



Développement de modèles macroscopiques pour des systèmes quantiques non linéaires hors équilibre

Mamodyasine Patel

► To cite this version:

Mamodyasine Patel. Développement de modèles macroscopiques pour des systèmes quantiques non linéaires hors équilibre. Mathématiques [math]. Université Rennes 1, 2005. Français. NNT: . tel-00008345

HAL Id: tel-00008345

<https://theses.hal.science/tel-00008345>

Submitted on 3 Feb 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

N° d'Ordre : 3137

THÈSE

présentée

DEVANT L'UNIVERSITÉ DE RENNES 1

pour obtenir

le grade de DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE RENNES 1

Mention Mathématiques et applications

par

Mamodyasine PATEL

Institut de Recherche Mathématique de Rennes

École doctorale MATISSE

U.F.R. de Mathématiques

TITRE DE LA THÈSE :

***Développement de modèles macroscopiques pour des systèmes quantiques
non-linéaires hors-équilibre***

Sous la direction de Francis Nier

Soutenue le 24 janvier 2005 devant la Commission d'Examen

COMPOSITION DU JURY

M.	N. Ben Abdallah	Rapporteur
Mme	C. Cancelier	Examinatrice
M.	F. Nier	Directeur
Mme	G. Perelman	Examinatrice
M.	J. Sjöstrand	Rapporteur
M.	D. Yafaev	Examineur

Table des matières

Introduction	
Problématique	7
Modèle	8
<i>Potentiel</i>	8
<i>Hamiltonien</i>	9
<i>Problème hors-équilibre</i>	9
<i>Équation de Schrödinger</i>	10
<i>Équation de Poisson</i>	10
<i>Couplage Schrödinger-Poisson</i>	10
Résultats connus	11
Plan de lecture. Résultats	11
<i>Première partie</i>	11
<i>Deuxième partie</i>	11
<i>Troisième partie</i>	12
<i>Quatrième partie</i>	12
<i>Cinquième partie</i>	12
<i>Sixième partie</i>	13
Conclusion	14
Partie I Position du problème	
1 Le problème des puits quantiques dans une île semi-classique	
1.1 Notations	19
1.2 Propriétés spectrales	23
2 Système Schrödinger-Poisson	
2.1 Les équations	25
2.2 Cadre fonctionnel. Existence	28
Partie II Scattering. Résonances	
3 Principe d'absorption limite	
3.1 Rappels sur le saut de potentiel	33
3.1.1 Préliminaire : noyau de la résolvante	34
3.1.2 Principe d'absorption limite pour le saut de potentiel	37
3.2 Principe d'absorption limite pour $H = H_\infty + V$	39
4 Résolution spectrale. Absence de spectre singulier	
4.1 Fonction de Green	45
4.2 Résolution spectrale	48

4.3	Spectre de H .	54
5	États de diffusion	
5.1	Définition. Relation de dispersion	57
5.2	Fonctions du moment	60
6	Conditions aux bords transparentes	
6.1	Conditions à l'infini	61
6.2	Opérateur transparent. Problème affine de la diffusion	63
6.3	Calcul des états de diffusion sur un cas particulier	64
7	Résonances quantiques en dimension 1	
7.1	Plusieurs approches	69
7.2	Comment détecter les résonances ?	70
7.3	Opérateur avec conditions aux limites résonantes	73
7.4	Lien avec l'opérateur $H(h)$	75
7.5	Calcul explicite sur un exemple	77
7.5.1	Remarque préliminaire sur le problème sur la droite réelle	77
7.5.2	Calculs	78
7.5.3	Analyse asymptotique de l'équation (7.5.19)	80
7.6	Fin de la preuve de la proposition 3.15	83
	Partie III Techniques récurrentes	
8	Méthodes d'énergie (Agmon)	
8.1	Le point de départ	87
8.2	Métrique d'Agmon	89
8.3	Corollaires directs	93
9	Méthodes d'analyse fonctionnelle	
9.1	Calcul fonctionnel	95
9.2	Distance entre sous-espaces	96
9.3	Opérateurs à trace	98
10	Traces. Densité d'états locale	
10.1	Définition	101
10.2	Estimations traces	102
10.3	Calcul explicite dans le cas de la barrière de potentiel	105
10.4	Application au nombre de valeurs propres	108
10.5	Principe de monotonie	109
10.6	Application au problème linéaire du puits dans l'île.	112
10.7	Application au système Schrödinger-Poisson	113
	Partie IV Analyse du problème de Dirichlet	
11	Décroissance des fonctions propres	
11.1	Fonctions propres du problème de Dirichlet	119
11.2	Estimations uniformes par rapport au potentiel	122
12	Étude du problème à un puits	
12.1	Hypothèses	125
12.2	La stratégie	126
12.3	Spectre limite de Dirichlet. Énergies résonantes	126
12.4	Estimations sur la résolvante	134

13 Étude du problème à N puits

13.1 Hypothèses	139
13.2 Énergies résonantes. Multiplicité. Puits résonants	141
13.3 Effet tunnel aux puits non résonants	143
13.4 Spectre limite de Dirichlet	145
13.5 Estimations sur la résolvante	151
13.6 Estimation améliorée des fonctions propres	153

Partie V Asymptotique de la densité d'états locale**14 Problème des puits bouchés**

14.1 Existence de la résolvante pour le problème avec puits complètement bouché	159
14.2 Estimation pondérée de la résolvante	162
14.2.1 Densité d'états locale pour le puits bouché	163
14.3 Problème des puits partiellement bouchés	166
14.3.1 Existence de la résolvante	166
14.3.2 Estimation sur la résolvante	170

15 Prolongement méromorphe de la résolvante. Résonances

15.1 Hypothèses de travail	173
15.2 Situation de référence	175
15.3 Construction d'un inverse approché	177
15.3.1 Inverse approché à droite	179
15.3.2 Inverse approché à gauche	182
15.3.3 Estimations améliorées	186
15.4 Détection des résonances	189
15.4.1 Localisation des résonances	189
15.4.2 Signe la partie imaginaire des résonances	191
15.4.3 Minoration de la partie imaginaire	192
15.5 Norme de la résolvante aux conditions transparentes	196

16 Fonctions de l'énergie

16.1 Situation de départ	201
16.2 Forme précisée	204
16.3 Preuve du théorème 16.4	205
16.3.1 Lemmes préparatoires	206
16.3.2 Résidus	208

Partie VI Asymptotique hors-équilibre**17 Fonctions du moment asymptotique**

17.1 Remarque préliminaire	215
17.2 Hypothèses. Résultat immédiat	216
17.3 Calcul des fonctions du moment	219
17.4 Puits résonants alimentés/non-alimentés	220
17.4.1 Cas où les puits sont groupés	221
17.4.2 Cas où les puits sont isolés	225

18 Solutions quantiques

18.1 Hypothèse de simplicité	231
--	-----

18.2	Formule de Breit-Wigner	233
18.3	Règle d'or de Fermi	239
18.4	Calcul de solutions quantiques	242
18.4.1	Réduction à une analyse puits par puits	243
18.4.2	Le résultat précisé	245
18.5	Calculs explicites	253
18.5.1	Le cas d'un puits	253
18.5.2	Le cas de deux puits	255
18.6	Preuve de résultats auxiliaires	257
18.6.1	Approximation WKB des états de diffusion	257
18.6.2	Preuve de la proposition 18.24	263
	Bibliographie	265
	Symboles	269
	Index	271

Introduction

Problématique

L'analyse mathématique issue de ce travail prend source dans le domaine de la physique mésoscopique. Très brièvement, disons que la physique mésoscopique est la physique des petits objets constitués d'assemblages d'atomes. Cette terminologie s'applique à des systèmes provenant de domaines aussi variés que la biochimie ou l'électronique pour ne citer que ceux-là. Le point notable est qu'à cette échelle, les longueurs caractéristiques des systèmes étudiés sont de l'ordre du nanomètre ($1\text{nm} = 10^{-9}\text{ m}$), et que ce sont les propriétés ondulatoires de la matière qui sont prépondérantes.

Dans le domaine de l'électronique par exemple, cette perspective offre d'un point de vue technologique la possibilité, largement exploitée aujourd'hui, de réaliser des dispositifs aux propriétés inédites.

Dans ce travail, on propose une description des phénomènes de transport d'électrons dans des semi-conducteurs, tels que les hétérostructures. L'exemple peut-être le plus connu est celui de la diode à effet tunnel résonant [Ka]. Mathématiquement, le problème est en soi intéressant puisqu'on verra qu'il conduit à l'analyse de propriétés spectrales d'opérateurs de Schrödinger 1D pour des potentiels présentant des sauts et des puits quasi-ponctuels.

L'objectif ici est de proposer des modèles réduits effectifs et bien fondés pour la description de ces phénomènes non-linéaires de transport. Du point de vue mathématique, cela consiste en l'analyse de systèmes d'équations du type Schrödinger-Poisson.

Pour être pertinents, ces modèles doivent notamment permettre de retrouver les phénomènes mis en évidence et bien connus des physiciens (notamment phénomènes d'hystérèse, apparition de courants stationnaires/oscillants, [JLPS], [Bo]). Par ailleurs ils doivent permettre de proposer des algorithmes de calcul implémentables et peu coûteux : en effet, dans l'analyse numérique de ce type de problèmes,

la difficulté structurelle réside dans l'existence de deux échelles caractéristiques due au phénomène de résonance. Ainsi, la finalité de ce modèle est double : fournir d'une part des renseignements qualitatifs (nombre de solutions, diagrammes de bifurcation), c'est le caractère *prédictif* du modèle, et d'autre part de fournir des données quantitatives assez précises (première localisation des solutions pour un calcul plus fin par la suite à l'aide de méthodes plus sophistiquées) : c'est le caractère *effectif* du modèle. D'autres travaux dans la même logique ont été amorcés notamment dans [PrSj] ou [Pe], mais pour l'instant on peut affirmer qu'aucun modèle satisfaisant sur le plan mathématique n'a été avancé pour permettre un traitement systématique. Cette thèse propose un point de départ dans l'analyse théorique du problème, les aspects algorithmiques étant pour leur part exposés dans [NiPa].

Modèle

Le propos de cette thèse n'étant pas d'aborder les propriétés physiques des semi-conducteurs, on renvoie le lecteur par exemple à [Kit], [Bre] ou [Ka] pour ces aspects. Il est néanmoins bon de savoir que dans ce contexte, les modèles unidimensionnels sont pertinents et font intervenir assez naturellement des sauts de potentiel dans les structures. Par ailleurs le système Schrödinger-Poisson étant faiblement non-linéaire, le gros de l'analyse consiste à comprendre le problème linéaire. L'étude dite hors-équilibre de ces structures, au sens où le système est loin de l'équilibre thermodynamique (afin d'engendrer un courant électronique), repose en grande partie sur une étude assez précise de quantités spectrales qui jusqu'à présent n'ont pas bénéficié d'analyse systématique, telles que les fonctions du moment asymptotique. En outre la présence de puits de potentiel génère des résonances et qui jouent un rôle crucial dans l'asymptotique. Enfin, il est à noter que bien que le cadre particulier de la dimension 1 autorise des calculs plus explicites et simplifie certains aspects techniques, il demeure suffisamment général pour mettre en évidence le type de difficultés spectrales dans le contexte non auto-adjoint sous-jacent.

Potentiel

Il est pertinent de s'intéresser à des potentiels du type puits quantique dans une île avec barrières franches. Dans une telle situation, deux échelles entrent en jeu : d'une part, les dimensions caractéristiques du système, ramenées à l'unité, et d'autre part les dimensions du puits quantique qui sont d'ordre $h > 0$, h petit. Dans l'objectif d'obtenir des modèles réduits simples au sens évoqué précédemment, on se placera dans le régime asymptotique où le paramètre h tend vers 0.

Ainsi, dans le cas d'une diode à effet tunnel résonant par exemple, on observe typiquement le genre de potentiels de la figure 1, c'est-à-dire :

$$V_0(x) = \tilde{V}(x) - W^h(x) \quad (0.0.1)$$

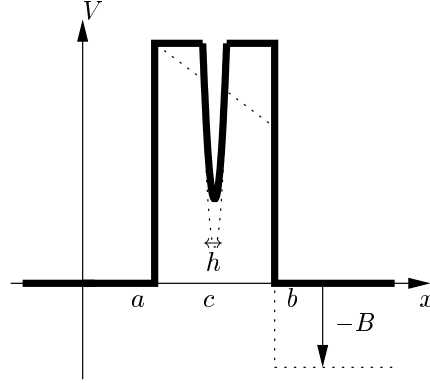


Figure 1. Profil du potentiel électrique dans une diode à effet tunnel.
En pointillés, le profil lorsqu'une différence de potentiel est appliquée.

où \tilde{V} est une fonction positive à support compact dans l'intervalle $[a, b]$ (qui représente les extrémités de la diode) tandis que W^h est une fonction représentant le puits quantique

$$W^h(x) := w((x - c)/h), \quad c \in]a; b[, \quad h > 0, w \in C_c^\infty(]a; b[) \quad (0.0.2)$$

qui se concentre à l'échelle h . La fonction W^h est la version lisse du saut de potentiel dans la structure.

Remarque importante. À ce stade de la description il faut déjà bien noter que la situation envisagée n'entre pas dans le cadre d'une étude purement semi-classique par la présence du puits quantique W^h .

La différence de potentiel appliquée au dispositif est décrite par la fonction \mathcal{B} :

$$\mathcal{B}(x) := -B \left(\mathbb{1}_{[a; b]} \frac{x - a}{x - b} + \mathbb{1}_{\{x \geq b\}} \right), \quad B > 0. \quad (0.0.3)$$

Hamiltonien

Enfin, il convient d'ajouter au potentiel total un terme non-linéaire V_{NL}^h , l'inconnue du problème (on l'explique dans le paragraphe), si bien que le hamiltonien total d'un électron est donné par :

$$H(h) := -h^2 \frac{d^2}{dx^2} + \tilde{V} - W^h + \mathcal{B} + V_{NL}^h. \quad (0.0.4)$$

Problème hors-équilibre

Dans le problème non-linéaire étudié, la physique à décrire est celle d'un dispositif électronique (diode, hétérostructure, *etc.*) dans lequel sont injectés des électrons suivant une certaine distribution en moment. En ce sens on parle de problème *non-linéaire hors-équilibre*, par opposition aux problèmes *à l'équilibre*, où la statistique d'injection dépend seulement de l'énergie : si dans ce dernier cas les états bornés de l'hamiltonien fournissent une description adéquate du système, dans le problème hors-équilibre, ce sont les états de diffusion.

Équation de Schrödinger

Dans ce type de problèmes quantiques, la distribution en impulsion des électrons est décrite par un opérateur ρ^h , positif borné à trace sur $L^2(a; b)$, ρ^h appelé matrice densité. L'analogue quantique de l'équation classique de Liouville (qui décrit l'évolution temporelle d'une distribution dans l'espace des phases) vérifiée par ρ^h est alors :

$$i\partial_t \rho^h = [H^h, \rho^h]. \quad (0.0.5)$$

Dans cette thèse, on se propose d'étudier le problème stationnaire, soit

$$[H^h, \rho^h] = 0. \quad (0.0.6)$$

Équation de Poisson

Précisons la nature du terme V_{NL}^h . Ce terme non-linéaire décrit les interactions électrostatiques entre les porteurs de charges, dans une approximation de champ moyen (modèle d'Hartree) : dans cette description statistique, le potentiel V_{NL}^h , appelé potentiel auto-consistant, est dû à la répulsion électrostatique d'une particule dans le champ créé par les particules voisines. Ainsi le potentiel V_{NL}^h vérifie une équation de Poisson :

$$-\Delta V_{NL}^h = n^h, \quad V_{NL}^h(a) = V_{NL}^h(b) = 0 \quad (0.0.7)$$

où la densité de charges n^h est une mesure finie sur l'intervalle $[a; b]$. Elle est définie par dualité par la formule (0.0.8).

Couplage Schrödinger-Poisson

Le couplage entre les équations de Schrödinger et Poisson se fait à travers l'opérateur ρ^h , puisque la mesure n^h est définie par

$$\forall \varphi \in C_c^0([a; b]), \quad \int_{[a; b]} \varphi(x) dn^h[x] = \text{Tr}(\rho^h \varphi). \quad (0.0.8)$$

Ainsi la connaissance du potentiel non-linéaire V_{NL}^h permet par l'équation de Poisson (0.0.7) de calculer la densité de charges n^h et permet, retrouvant ρ^h par (0.0.8) de vérifier si l'équation de Liouville quantique stationnaire (0.0.6) est satisfaite.

La question naturelle dans la limite $h \rightarrow 0$ est alors la suivante : peut-on décrire de façon simple l'asymptotique des solutions au problème non-linéaire ? Peut-on alors calculer ces solutions ?

Résultats connus

Les résultats d'existence de solutions stationnaires au système Schrödinger-Poisson sont bien connus ([BenDegMar], [Ni1]). Toutefois, il n'a pas été établi d'estimations uniformes par rapport à h sur le potentiel. On obtient ce genre d'estimations dans cette thèse. Ensuite, l'idée directrice sur l'asymptotique des solutions, et qui provient de la physique, est que l'ensemble des états du système est déterminé par un ensemble *fini* de paramètres : la première étape dans l'analyse qualitative du système est de ramener le système dynamique (0.0.5) à un système de dimension finie.

Plus précisément, les physiciens prétendent que la dynamique est gouvernée par l'ensemble des résonances du système. Conformément à cette idée, la concentration en h des puits quantiques ne devrait générer qu'un nombre fini de résonances, et on verra dans l'analyse théorique du problème linéaire, que les résonances jouent effectivement un rôle déterminant dans l'asymptotique du problème.

Plan de lecture. Résultats

Dans cette thèse, on s'est limité à l'analyse du problème stationnaire. Néanmoins le texte est très long. On a souhaité faire de cette étude un document auto-contenu et en un sens, didactique. Certaines parties établissent inévitablement des résultats bien connus mais ainsi rassemblés dans ce document. Celles-ci peuvent être par conséquent passées. Le programme est découpé de la façon suivante :

Première partie

On fixe les notations et hypothèses une fois pour toutes.

Deuxième partie

Cette partie contient des résultats très classiques. Notamment on établit :

- un principe d'absorption limite pour le Hamiltonien (cor. 3.17 p.42).
- l'existence d'un développement en fonctions propres généralisées, et la définition des états de diffusion (chapitre 5).

- un cadre adapté au traitement des résonances dans la situation unidimensionnelle par l'introduction de conditions transparentes (chapitres 6 et 7).

On notera également la présence de calculs explicites des états de diffusion faits dans le cas de la barrière de potentiel, ainsi que des résonances dans le cas d'un puits de potentiel ponctuel (prop. 6.10 p.65 et 7.14 p.82).

Troisième partie

- On rappelle au chapitre 8 les techniques d'Agmon qui s'appuient sur des égalités d'énergie. Le chapitre 9 rappelle certaines techniques utiles d'analyse fonctionnelle.
- Le chapitre 10 est important dans la mesure où l'on y présente une série d'estimations en norme trace. On en tire en particulier le résultat de finitude du nombre de valeurs propres pour le problème de Dirichlet (cor.10.13 p.108). On y trouve également les résultats pour la théorie non-linéaire, à savoir :

■ **Théorème.** *La famille de mesures $(dn^h)_{h>0}$ définie par (0.0.8) est uniformément bornée (cor. 10.19 p.114). En outre, la famille de potentiels $(V_{NL}^h)_{h>0}$ est relativement compacte dans l'espace de Hölder $C^{0,\alpha}(I)$, $\alpha \in (0, 1)$ (cor.10.20 p.115).*

L'obtention de ces résultats repose sur des arguments de monotonie, à savoir qu'une fonction du moment est dominée par une fonction de l'énergie, et que, dit très grossièrement, le nombre moyen de particules est une fonction décroissante par rapport à la hauteur des barrières (prop. 10.5 p.111).

Quatrième partie

Cette partie renferme tous les résultats relatifs à la localisation des états propres du problème de Dirichlet sur l'île, le calcul des positions limites des valeurs propres. Cela permet de définir la notion d'énergie résonante $\lambda \in \mathcal{E}_{\text{rés}}$, et de puits résonant associées à cette énergie $\{c_i\}_{i \in J(\lambda)}$. Grossièrement, disons que les énergies résonantes, qui ne dépendent que du potentiel, sont les énergies λ pour lesquelles les particules envoyées sur l'île semi-classique atteignent les puits. On y trouve enfin les estimations ponctuelles de résolvante.

Cinquième partie

Cette partie complète la théorie linéaire puisque par des arguments perturbatifs (type problème de Grushin), on donne une expression de la densité spectrale ainsi qu'un résultat important sur son asymptotique, à savoir :

■ **Théorème.** Soit $\theta \in C_c(0; \inf \tilde{V} - B)$ une fonction positive. Soit dn_θ une valeur d'adhérence de la famille de mesures sur I , notées $(dn_\theta(H(h)))_{h>0}$, et définies par la relation

$$\forall \varphi \in C^0([a; b]), \quad \int_a^b \varphi(x) dn_\theta(x) = \text{Tr}(\theta(H^h)\varphi).$$

Alors, en restriction à $(a; b)$:

$$dn_\theta = \sum_{\lambda \in \text{supp } \theta \cap \mathcal{E}_{\text{rés}}} \sum_{i \in J(\lambda)} t_i^\lambda \theta(\lambda) \delta_{c_i},$$

et les coefficients t_i^λ sont égaux à 1 (théorème 16.4 du chapitre 16).

Sixième partie

Cette dernière partie regroupe la plupart des résultats nouveaux sur l'étude des fonctions du moment asymptotique $g(K_-^h)$, avec g de la forme (cf. notations précédentes) :

$$g(k) \equiv 0 \quad \forall k \leq 0, \quad g(\sqrt{\lambda}) = \theta(\lambda).$$

La matrice densité prend alors l'expression :

$$\rho^h(x, y) = \int_k g(k) \psi_-^h(k, x) \overline{\psi_-^h(k, y)} \frac{dk}{2\pi h},$$

où $\psi_-^h(k, x)$ est un état de diffusion du Hamiltonien H^h . Un corollaire immédiat du théorème précédent est que

■ **Théorème.** Soit dn^0 une valeur d'adhérence de la famille de mesures $(dn^h)_{h>0}$. Alors, en restriction à $(a; b)$:

$$dn^0 = \sum_{\lambda \in \text{supp } \theta \cap \mathcal{E}_{\text{rés}}} \sum_{i \in J(\lambda)} t_i^\lambda \theta(\lambda) \delta_{c_i},$$

et les coefficients t_i^λ sont dans l'intervalle $[0; 1]$ (prop. 17.4 p.217).

Ce résultat donne avec l'équation de Poisson le

■ **Corollaire.** En particulier, toute valeur d'adhérence dans $C^{0,\alpha}(I)$ de la famille de potentiels $(V_{N_L}^h)_{h>0}$ est une fonction affine sur chaque intervalle $[c_i; c_{i+1}]$.

Les résultats présentés ensuite sont partiels en ce sens que l'asymptotique des fonctions du moment est établie pour certaines configurations des puits dans l'île. On distingue le cas des puits *bien groupés* ou *isolés*, dans la situation où ceux-ci sont *alimentés* ou *non-alimentés* (notions définies pp.219, 221, 225).

■ **Théorème.** *On fixe une énergie résonante λ . On suppose ou bien :*

a) que les puits résonants à cette énergie sont bien groupés, ou bien

b) que tous les puits quantiques sont strictement isolés.

Soit ensuite dn^0 une valeur d'adhérence de la famille de mesures $(dn^h)_{h>0}$. Alors :

Dans la situation a), si les puits résonants sont tous alimentés (resp. tous non-alimentés), les coefficients t_i^λ sont égaux à 1 (resp. égaux à 0) (théorème 17.19 p. 221).

Dans la situation b), si tous les puits quantiques sont alimentés (resp. non-alimentés), les coefficients t_i^λ sont égaux à 1 (resp. égaux à 0) (théorème 17.25 p. 226).

On ne met ainsi en évidence que des solutions de type classique, au sens où les coefficients t_i^λ ne prennent que les valeurs 0 et 1. Qui plus est, ces solutions apparaissent dans des cas non-critiques, au sens où les puits sont franchement d'un côté de l'île (situation a)), ou confinés loin du bord (situation b)).

On met enfin en évidence, dans le dernier chapitre, la possible existence de solutions non-classiques dans les cas particuliers d'un ou de deux puits :

■ **Théorème.** *Il existe des cas où les coefficients t_i^λ sont dans l'intervalle $]0; 1[$.*

Cet énoncé assez vague est précisé dans le dernier chapitre. Au passage on y établit une formule de Breit-Wigner identique à celle de [GeMa] et une formule du type *règle d'or de Fermi* reliant la partie imaginaire de la résonance à des grandeurs géométriques (théorèmes 18.5 et 18.14). Dans cette situation, on parvient même à donner une formule explicite pour les coefficients t_i^λ (théorème 18.33 p. 248).

Conclusion

Cette analyse asymptotique a permis de mettre en évidence la diversité, ainsi que la complexité de l'ensemble des solutions stationnaires possibles pour le système Schrödinger-Poisson présenté dans cette thèse, et constitue une étape préalable au traitement de la dynamique. Si l'asymptotique stationnaire est assez claire dans les cas cités précédemment, certaines configurations des puits quantiques peuvent donner lieu à des résonances multiples, sinon très concentrées : dans ces cas éventuels de non-diagonalisabilité ou de mauvais conditionnement de la diagonalisation du problème non-autoadjoint sous-jacent, les méthodes utilisées ne

permettent malheureusement pas d'étendre nos résultats. De façon générale, une analyse systématique de ces cas dégénérés, déjà pertinents en soi, mais nécessaires dans notre contexte, pourrait offrir une meilleure compréhension des phénomènes en jeu ici, et soulever des problèmes spectraux originaux.

Signalons enfin que des aspects algorithmiques ou numériques, évoqués dans [NiPa], sont en cours de développement.

Partie I

Position du problème

Le problème des puits quantiques dans une île semi-classique

Dans ce bref chapitre, on introduit les principaux objets que l'on étudiera dans l'analyse linéaire.

1.1 Notations

■ **1.1. Notation.** Dans tout le texte, $I := [a; b]$ désignera un intervalle de \mathbb{R} non vide.

On considère l'opérateur différentiel

$$P_{\text{réf}}(h, x, h \frac{d}{dx}) \equiv P_{\text{réf}}(h) := -h^2 \frac{d^2}{dx^2} + \mathcal{B}, \quad (1.1.1)$$

où la fonction \mathcal{B} , qui représente la différence de potentiel appliquée au dispositif, est définie par

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \mathcal{B}(x) := \mathcal{B}_0(x) + \mathcal{B}_\infty(x - b). \quad (1.1.2)$$

Les fonctions \mathcal{B}_0 et \mathcal{B}_∞ sont elles-mêmes données par (cf figure 1.1) :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \mathcal{B}_\infty(x) := -B \cdot \mathbb{1}_{x \geq 0}(x), \quad \mathcal{B}_0(x) := -B \cdot \mathbb{1}_{[a; b]} \cdot \frac{x - a}{x - b}, \quad (1.1.3)$$

B étant une constante positive donnée. L'opérateur $P_{\text{réf}}$ correspond au problème de référence. De façon similaire, on introduit l'opérateur $P_\infty(h)$ défini par

$$P_\infty(h, x, h \frac{d}{dx}) \equiv P_\infty(h) := -h^2 \frac{d^2}{dx^2} + \mathcal{B}_\infty(\cdot - b), \quad (1.1.4)$$

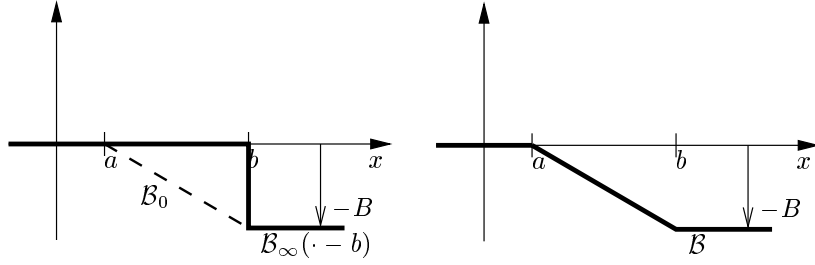


Figure 1.1. Fonctions B_0 , B_∞ et $B := B_0 + B_\infty$.

si bien que

$$P_{\text{réf}}(h) = P_\infty(h) + B_0. \quad (1.1.5)$$

L'opérateur $P_\infty(h)$ correspond au problème de la marche ou du saut de potentiel. Ensuite on définit l'opérateur

$$\tilde{P}(h, x, h \frac{d}{dx}) \equiv \tilde{P}(h) := P_\infty(h, x, h \frac{d}{dx}) + \tilde{\mathcal{V}}^h. \quad (1.1.6)$$

qui correspond au problème dit “avec puits bouché”. Le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h$ se décompose lui-même en :

$$\tilde{\mathcal{V}}^h := \tilde{V}_0 + V_{NL}^h, \quad (1.1.7)$$

et on a donc

$$\tilde{P}(h) = P_\infty(h) + \tilde{V}_0 + V_{NL}^h. \quad (1.1.8)$$

Explicitons chacun des termes et faisons quelques hypothèses.

■ **1.2. Hypothèse.** La fonction \tilde{V}_0 est une fonction lipschitzienne positive ou nulle donnée, à support compact dans $I = [a; b]$:

$$\tilde{V}_0 \in W^{1,\infty}(I), \quad \tilde{V}_0 \geq 0. \quad (1.1.9)$$

On suppose que

$$\Lambda_0 := \inf_{x \in [a; b]} \tilde{V}_0(x) > 0. \quad (1.1.10)$$

Typiquement, le potentiel \tilde{V}_0 est de la forme $V_0 \cdot \mathbb{1}_I + B_0$ (cf. figure 1.2) pour une constante $V_0 > 0$. Dans l'étude du problème, on fixera un domaine spectral (on dira parfois d'énergie) compact bien choisi :

■ **1.3. Hypothèse.** On fixe ensuite des réels Λ_* , et Λ^* tels que

$$0 < \Lambda_* < \Lambda^* < \Lambda_0.$$

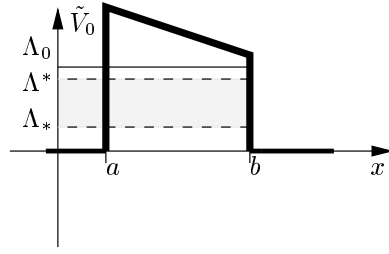


Figure 1.2. Exemple de potentiel \tilde{V}_0 , $\tilde{V}_0 = V_0 \cdot \mathbb{1}_I + \mathcal{B}_0$, $V_0 \in \mathbb{R}_+^*$.

La bande d'énergie $[\Lambda_*; \Lambda^*]$ est fixée, et l'on s'intéressera à des fonctions du Hamiltonien localisées dans cette fenêtre. Noter que l'on a évité l'énergie zéro.

■ **1.4. Hypothèse.** La famille de fonctions $(V_{NL}^h)_{h>0}$ est une famille de fonctions positives ou nulles dans $W^{1,\infty}(I)$ et uniformément bornée :

$$\exists C > 0 \text{ telle que } \forall h > 0, \quad \|V_{NL}^h\|_{W^{1,\infty}} \leq C. \quad (1.1.11)$$

Le potentiel V_{NL}^h est *a priori* inconnu. Dans le problème non-linéaire, c'est le terme contenant la non-linéarité. Introduisons à présent le problème du puits dans l'île.

■ **1.5. Notation.** On fixe un entier $N \in \mathbb{N}^*$, et $c_1 < \dots < c_N$, N points dans $]a; b[$. On introduit pour $i = 1 \dots N$, N fonctions $w_i \in C_c^\infty([-1; 1])$, $w_i \geq 0$. On notera

$$w_\infty := \max_i \|w_i\|_\infty.$$

■ **1.6. Hypothèse.** On suppose que les puits de potentiels sont donnés par

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad W^h(x) := \sum_{i=1}^N w_i \left(\frac{x - c_i}{h} \right), \quad (1.1.12)$$

et on notera

$$U^h := \text{supp } W^h. \quad (1.1.13)$$

U^h sera appelé l'ensemble des puits quantiques.

Ainsi les puits quantiques consistent en la réunion de N h -voisinages compacts des points c_i . Les fonctions w_i sont connues. Elle définissent le profil du puits de potentiel (cf. figure 1.3).

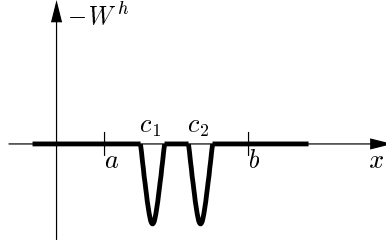


Figure 1.3. Les puits quantiques.

■ **1.7. Notation.** On désignera par $P(h)$ l'opérateur

$$P(h) := \tilde{P}(h) - W^h = P_\infty(h) + \mathcal{V}^h, \quad \mathcal{V}^h := \tilde{\mathcal{V}}^h - W^h, \quad (1.1.14)$$

et qui correspond au problème des puits quantiques dans une île semi-classique.

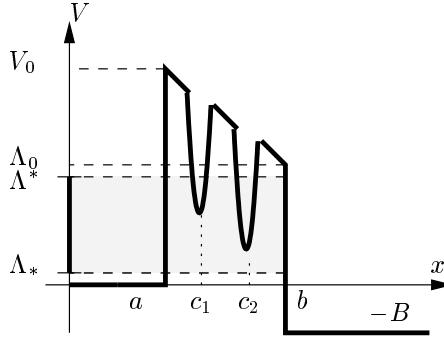


Figure 1.4. Exemple de potentiel lorsque $\tilde{V}_0 \equiv V_0 \cdot \mathbb{1}_{[a;b]}$, $V_{NL}^h \equiv 0$.

Les opérateurs introduits $P_\infty(h)$, $P_{\text{réf}}(h)$, $\tilde{P}_\infty(h)$, et $P_\infty(h)$, vus comme opérateurs non-bornés sur $L^2(\mathbb{R})$ et de domaine $H^2(\mathbb{R})$, sont auto-adjoints, cf. [ReSi2].

■ **1.8. Notation.** On notera $H(h)$ (resp. $\tilde{H}(h)$) le hamiltonien opérant sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R})$ par

$$H(h)u = P(h)u,$$

(resp. $\tilde{H}(h)u = \tilde{P}(h)u$) et de domaine $D(H) = H^2(\mathbb{R})$ (resp. $D(\tilde{H}) = H^2(\mathbb{R})$). On définit enfin de façon similaire $H_\bullet(h)$ par

$$H_\bullet(h)u := P_\bullet(h)u, \quad u \in D(H_\bullet(h)) \quad D(H_\bullet(h)) = H^2(\mathbb{R}),$$

où $\bullet = \text{réf. } \infty$.

1.2 Propriétés spectrales

Remarquant que $H(h)$ est une perturbation relativement compacte de H_∞ , il suit par le théorème de Kato, cf. p. ex. [ReSi2], que les spectres essentiels de ces deux opérateurs sont les mêmes. On a ainsi

$$\sigma_{\text{ess}}(H(h)) = \sigma_{\text{ess}}(H_\infty(h)) = [-B; +\infty), \quad (1.2.1)$$

la dernière égalité étant établie dans le corollaire 3.10 du chapitre 3. On verra également (cf. corollaire 4.10) que l'on a

$$\sigma_{\text{ac}}(H(h)) = \sigma_{\text{ess}}(H(h)).$$

Ainsi dans le plan spectral, le demi-axe $[-B; +\infty)$ est une coupure pour la résolvante en tant que fonction méromorphe définie sur \mathbb{C} (cf. figure 1.5).

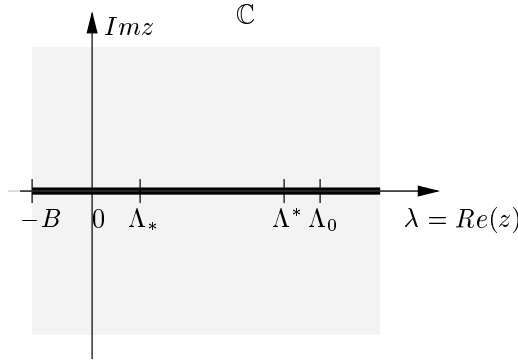


Figure 1.5. Dans le plan spectral, le demi-axe $[-B; \infty)$ est une coupure pour la fonction méromorphe $R(z; h)$.

On souhaite dans un premier temps calculer les fonctions du Hamiltonien pour des fonctions supportées dans un domaine $\Lambda \subset [\Lambda_*; \Lambda^*]$ du spectre continu, c'est-à-dire plus précisément, d'après le calcul fonctionnel

$$f(H(h)) \equiv \int_{\Lambda} f(\lambda) \frac{\partial E}{\partial \lambda}(\lambda; h) d\lambda, \quad \forall f \in C^0(\Lambda), \quad (1.2.2)$$

où on a noté $(E(\lambda; h))_\lambda$ la résolution spectrale de $H(h)$. Pour cela, on cherche à obtenir une formule asymptotique précise pour la résolvante $R(z; h)$ de l'opérateur $H(h)$. En effet, d'après la formule de Stone et le principe d'absorption limite (voir [ReSi3]) rappelé au chapitre 3, (cf. corollaire 3.18 p.42), la densité spectrale est reliée à la résolvante $R(z; h)$ de l'opérateur $H(h)$ par la formule suivante :

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda}(\lambda; h) = \frac{1}{2i\pi} [R(\lambda + i0; h) - R(\lambda - i0; h)]. \quad (1.2.3)$$

Ainsi la densité spectrale est fournie par les valeurs au bord de la résolvante. Une façon de les calculer consiste à obtenir le prolongement méromorphe de la résolvante de part et d'autre de la coupure spectrale. Il se trouve que ce prolongement méromorphe fait apparaître des pôles qui sont précisément les résonances de l'opérateur $P(h, x, h d/dx)$. Cela étant, il peut être utile de considérer la résolvante comme une fonction méromorphe définie sur le revêtement à deux feuillets de $\mathbb{C} - [-B; \infty)$ (cf. figure 1.6). .

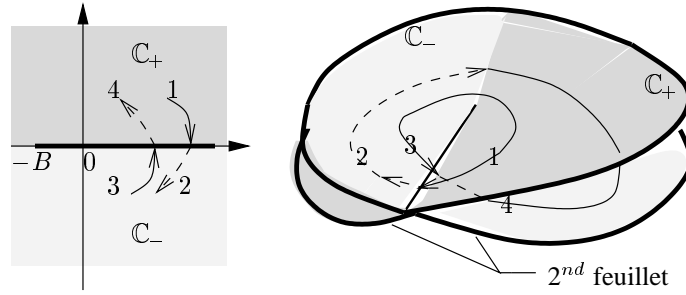


Figure 1.6. Revêtement à deux feuillets. Cette variété holomorphe est une surface non plongée dans \mathbb{R}^3 puisque la détermination de la racine se fait au signe près (on revient au point 1 après deux tours). Il revient au même dans le plan complexe de considérer à la fois les prolongements méromorphes de la résolvante de $\mathbb{C}_+ := \{z \in \mathbb{C} \mid \text{Im } z > 0\}$ vers \mathbb{C}_- ($1 \rightarrow 2$) et de \mathbb{C}_- vers \mathbb{C}_+ ($3 \rightarrow 4$) que de considérer la fonction définie sur le revêtement.

Dans le chapitre 7, on explique comment, pour la situation particulière qui nous intéresse on peut, en introduisant des conditions aux limites convenables détecter ces résonances.

Système Schrödinger-Poisson

Ce système consiste en fait en un couplage entre une équation de Liouville stationnaire et une équation de Poisson. On rappelle les résultats d'existence, après avoir décrit ce couplage.

2.1 Les équations

La partie non-linéaire consiste en l'analyse du problème semi-linéaire suivant, d'inconnue $V_{NL}^h \in L^\infty(I)$:

$$\begin{cases} [H(h), \rho^h] = 0 \\ H(h) = H_{\text{réf}}(h) + \tilde{V}^h - W^h \\ \tilde{V}^h = \tilde{V}_{\text{int}} + V_{NL}^h \\ V_{NL}^h = V[\rho^h], \end{cases} \quad (2.1.1)$$

le potentiel $\tilde{V}_{\text{int}} \in W^{1,\infty}(I)$ étant une donnée du problème (typiquement V_{int} est une fonction constante sur I) Il s'agit d'une équation de Liouville stationnaire. L'opérateur ρ^h est appelé matrice densité. Il prescrit la répartition en moment (ou en vitesse) des particules injectées dans l'île. Remarquons que le Hamiltonien $H(h)$ ci-dessus peut s'écrire par définition de $H_{\text{réf}}(h)$

$$H(h) \equiv H_\infty(h) + \tilde{\mathcal{V}}^h - W^h, \quad \text{avec} \quad \tilde{\mathcal{V}}^h = \tilde{V}^h + \mathcal{B}_0.$$

Faisons alors des hypothèses

■ **2.1. Hypothèse.** *Le potentiel $\tilde{V}_0 := \tilde{V}_{\text{int}} + \mathcal{B}_0$ satisfait l'hypothèse (1.2).*

On verra en effet que le potentiel inconnu est $W^{1,\infty}$ à cause du couplage non-linéaire. L'hypothèse spectrale suivante est commode pour la caractérisation des solutions de (2.1.1).

■ **2.2. Hypothèse.** *On suppose que pour $i = 1 \dots N$, on a*

$$\inf \sigma(-\Delta - w_i) \geq -\inf \tilde{V}_0,$$

$-\Delta$ désignant le Laplacien libre sur \mathbb{R}

En dimension 1, et sous l'hypothèse 2.2 permettant d'éliminer les états bornés, les opérateurs commutant avec le Hamiltonien sont les fonctions du moment asymptotique [Ni1]. Le noyau est alors donné par

$$\rho^h[x, y] := \int_{\mathbb{R}^*, k \neq -B} g(k) \psi_-^h(k, x) \overline{\psi_-^h(k, y)} \frac{dk}{2\pi h}, \quad g \in C^0(\mathbb{R}^* - \{-B\}) \quad (2.1.2)$$

où g est une fonction arbitraire, et $\{\psi_-^h(k, \cdot)\}_k$ sont les fonctions propres généralisées du Hamiltonien $H(h)$, ou états de diffusion. Grossièrement, disons que les fonctions propres généralisées, sous réserve d'existence, diagonalisent le Hamiltonien sur le spectre continu : elles jouent le rôle vis-à-vis de $H(h)$ le même rôle que les ondes planes e^{ikx} pour le Laplacien. Celles-ci sont définies de façon rigoureuse à partir des formules (4.1.5)-(4.1.6), voir déf. 5.2 p.59, et permettent de donner un sens rigoureux à (2.1.2).

■ **2.3. Hypothèse.** *On suppose que la fonction g est de la forme :*

$$g(k) = f(k^2) \cdot \mathbb{1}_{\{k>0\}}, \quad f \in C_c^0(\Lambda_*; \Lambda^*), \quad f \geq 0.$$

À partir de maintenant, la fonction g est une donnée du problème fixée une fois pour toutes.

La fonction g représente un faisceau d'électrons incidents provenant de $-\infty$ répartis en énergie suivant la densité f . Dans ce genre de problèmes, dits ouverts, l'état quantique d'une particule incidente n'est pas connu. On procède à une description statistique, donnée par la densité g . Dans les applications concrètes g est une statistique de Fermi-Dirac (cf. figure 2.1) :

$$g(k) = \frac{1}{\beta} \ln \left(1 + e^{\beta(1-k^2)} \right) \cdot \mathbb{1}_{\{k>0\}}, \quad \beta > 0. \quad (2.1.3)$$

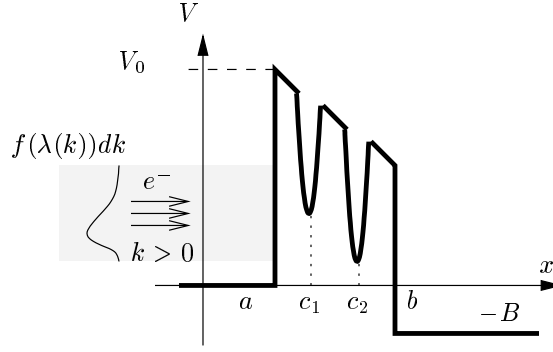


Figure 2.1. Le courant entrant dans la diode est représenté par une superposition d'états de diffusion $\psi_-(k, \cdot)$ pondérés par la mesure $f(\lambda(k))dk$.

Noter néanmoins que dans notre étude, on s'est placé loin de l'énergie $\lambda(k) = 0$, puisque $\lambda \in [\Lambda_*; \Lambda^*]$.

La non-linéarité est contenue dans le terme $V[\rho^h]$, et le potentiel \tilde{V}_0 , qui est connu et donné, satisfait l'hypothèse (1.1). Dans ce contexte la matrice densité ρ^h vérifie la propriété suivante :

■ **2.4. Proposition.** La matrice densité $\rho^h \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ est un opérateur positif, et localement à trace, i.e. pour toute fonction φ à support compact dans \mathbb{R} , l'opérateur $\varphi \rho^h \varphi$ est à trace.

2.5. Remarque. La condition de normalisation usuelle de la matrice densité, à savoir $\text{Tr}[\rho^h] = 1$ n'a pas de sens dans le contexte des systèmes ouverts, puisque la quantité totale de particules est infinie.

On définit alors une densité de charges hors-équilibre par la relation suivante :

■ **2.6. Définition.** On notera $dn[\rho^h]$ la mesure de Radon positive définie par la relation :

$$\forall \varphi \in C^0([a; b]), \quad \text{Tr}[\mathbb{1}_{[a; b]} \rho^h \mathbb{1}_{[a; b]} \varphi] \equiv \int_{[a; b]} \varphi(x) dn[\rho^h](x).$$

D'après (2.1.2) la mesure bornée $dn[\rho^h](x)$ est donnée par la formule

$$dn[\rho^h](x) = \int_{k>0} f(k^2) |\psi_-(k, x)|^2 \frac{dk}{2\pi\hbar} dx. \quad (2.1.4)$$

En particulier, à $h > 0$ fixé, la mesure $dn[\rho^h]$ est à densité L^1 .

Le couplage non-linéaire de (2.1.1) avec l'équation de Poisson se fait à travers le potentiel $V[\rho^h]$, obtenu comme solution de l'équation de Poisson

$$\begin{cases} -\Delta V_{NL}^h = n[\rho^h] \\ V_{NL}^h(a) = 0 = V_{NL}^h(b). \end{cases} \quad (2.1.5)$$

Ce potentiel est le potentiel électrostatique créé par les charges incidentes elles-mêmes. On l'appelle potentiel auto-consistant.

2.7. Remarque. Noter que la mesure $n[\rho^h]$ étant positive, l'équation de Laplace entraîne que la fonction $V[\rho^h]$ est concave et positive.

2.2 Cadre fonctionnel. Existence

Dans [Ni1] et [BenDegMar] notamment, l'existence de solutions pour $h > 0$ fixé a été démontrée. La preuve repose sur un argument de point fixe du type Leray-Schauder. Ceci étant acquis, on voudrait établir l'existence d'une asymptotique des solutions dans la limite $h \rightarrow 0$. Il se trouve que les estimations *a priori* obtenues dans [Ni1] et [BenDegMar] ne sont pas uniformes en $h > 0$, ce qui justifie l'étude ultérieure (cf. chapitre 10, sections 10.6 et 10.7). Introduisons l'espace suivant adapté à notre analyse.

■ **2.8. Définition.** Notons $(\mathcal{M}_b(I), \|\cdot\|_m)$ l'espace de Banach des mesures boréliennes complexes sur I . On introduit l'espace suivant :

$$BV_0^2(I) := \{V \in C^0(I) \mid V'' \in \mathcal{M}_b(I), \quad V(a) = V(b) = 0.\},$$

que l'on munit de la norme :

$$\|V\|_{2,\infty} := |V|_{L^\infty} + \|V''\|_m.$$

En conséquence des injections classiques des espaces de fonction (cf. [Bré]), on a

■ **2.9. Proposition.** L'espace $BV_0^2(I)$ est un espace de Banach. On a de plus les injections continue suivantes

$$BV_0^2(I) \hookrightarrow W^{1,\infty}(I), \quad \text{et} \quad BV_0^2(I) \hookrightarrow C^{0,\alpha}(I), \quad \alpha \in]0; 1[$$

où $C^{0,\alpha}(I)$ désigne l'espace de Hölder sur I . En outre, l'injection dans $C^{0,\alpha}(I)$ est compacte.

La première partie de cette thèse consiste en l'analyse linéaire du problème. Le système Schrödinger-Poisson présenté ici est faiblement non-linéaire puisque l'inconnue est le coefficient V_{NL}^h de l'équation (on parle de problème semi-linéaire). Dans le chapitre suivant, on commence par poser les quantités du scattering nécessaires à l'étude.

Partie II

Scattering. Résonances

Principe d'absorption limite

On commence par mettre en place les quantités du scattering qui sont nécessaires à l'étude du problème : en effet, si les états bornés (les vecteurs propres) fournissent une description adéquate de la physique à l'équilibre thermodynamique, ce sont les états de diffusion qui décrivent la situation hors-équilibre. Les états de diffusion du Hamiltonien $H(h)$ s'expriment à l'aide des valeurs au bord de la résolvante $R(z; h)$. On voit ainsi le lien avec la théorie *time-dependent* du scattering. Par définition du spectre, ces valeurs au bord ne sont pas des opérateurs bornés sur L^2 , tandis que la divergence de la norme est contrôlée, d'après le théorème spectral, par $|Im z|^{-1}$. Néanmoins, vues comme opérateurs sur des espaces L^2 à poids, ces valeurs au bord sont bien définies : les poids en question absorbent à la limite $z \rightarrow \lambda \in \sigma_{ac}(H(h))$ l'explosion de la norme de la résolvante.

Dans ce chapitre, et jusqu'à mention contraire, on fixera le paramètre h à la valeur $h = 1$.

3.1 Rappels sur le saut de potentiel

On commence par des calculs classiques sur l'opérateur non borné auto-adjoint H_B défini pour $B > 0$ par (cf. figure 3.1)

$$D(H_B) := H^2(\mathbb{R}), \text{ et, } \forall u \in D(H_B), \quad H_B u := -\frac{d^2 u}{dx^2} + \mathcal{B}_\infty \cdot u. \quad (3.1.1)$$

où la fonction \mathcal{B}_∞ est, rappelons-le, donnée par

$$\mathcal{B}_\infty(x) := -B \cdot \mathbb{1}_{x \geq 0}, \quad \mathcal{B}_\infty \in C^0(\mathbb{R}^*) \cap L^\infty(\mathbb{R}). \quad (3.1.2)$$

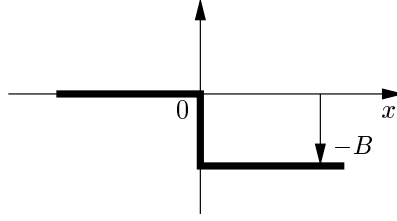


Figure 3.1. *Le saut de potentiel*

Dans une première étape, on établit un principe d'absorption limite pour cet hamiltonien. Pour cela, on calcule sa fonction de Green, c'est-à-dire le noyau distribution de la résolvante

$$\mathbb{C} - [-B, +\infty) \longrightarrow \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}), H^2(\mathbb{R})) \quad z \mapsto R_B(z) := (H_B - z)^{-1}.$$

Puisque la résolvante opère également entre $H^{-1}(\mathbb{R})$ et $H^1(\mathbb{R})$, et qu'en dimension 1 la mesure de Dirac est un élément de H^{-1} , on dispose de la relation suivante

$$R_B(z; x, y) = \langle \delta_x, w_y \rangle_{H^{-1}, H^1} \quad (3.1.3)$$

où w_y est la solution de l'équation

$$(H_B - z)w_y = \delta_y. \quad (3.1.4)$$

On verra dans le paragraphe suivant que la résolvante est un opérateur intégral.

3.1.1 Préliminaire : noyau de la résolvante

On s'intéresse à l'équation d'inconnue $u \in H^2(\mathbb{R})$:

$$-u'' + (\mathcal{B}_\infty - z)u = f, \quad f \in L^2(\mathbb{R}), \quad z \in \mathbb{C} - \mathbb{R} \quad (3.1.5)$$

1. Choix d'une racine carrée holomorphe adaptée.

On travaille sur l'ouvert $\mathbb{C} - \mathbb{R}$ qu'il sera commode de partitionner de la façon suivante :

■ **3.1. Notation.** *L'ouvert $\mathbb{C} - \mathbb{R}$ est noté*

$$\Omega = \Omega_+ \cup \Omega_-,$$

$$\text{où } \Omega_\pm := \{z \in \Omega, | \operatorname{Im} z \gtrless 0\}.$$

Pour ce problème, il est bon de considérer la détermination du logarithme avec coupure sur \mathbb{R}_+ , et coïncidant dans Ω_+ avec le logarithme usuel. C'est-à-dire :

$$\log(z) := \ln |z| + i\alpha,$$

où α est l'argument de z dans $]0; 2\pi]$. Il est également bon de noter qu'avec la définition de la racine carrée qui en découle, c'est-à-dire

$$\sqrt{z}^+ := \exp\left(\frac{\log(z)}{2}\right), \quad z \in \mathbb{C} - \mathbb{R}_+, \quad (3.1.6)$$

la partie imaginaire de \sqrt{z}^+ est positive. En particulier, si k est un nombre réel, on a $\sqrt{k^2 \pm i0}^+ = \pm|k|$, cf. figures 3.2- 3.3.

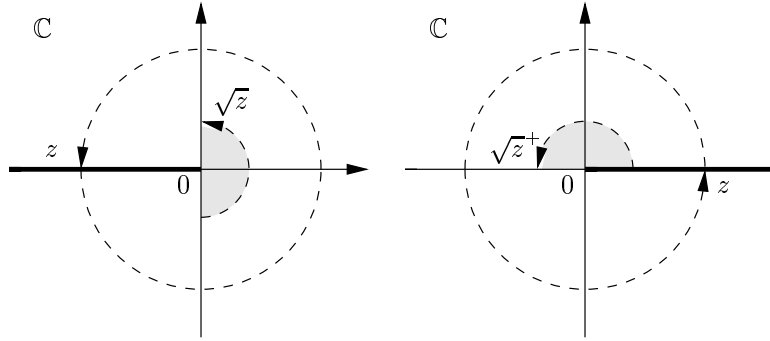


Figure 3.2. Lorsque l'argument de z tend vers 2π , l'argument de \sqrt{z}^+ tend vers π . La partie imaginaire de \sqrt{z}^+ est positive ou nulle.

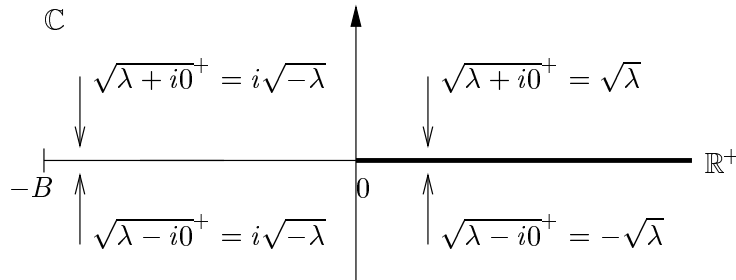


Figure 3.3. Pour $z := \lambda \pm i\varepsilon$, $\lambda \in]-B, \infty)$, $\lambda \neq 0$, et suivant la position de $\lambda = \text{Re}(z)$, les valeurs au bord de \sqrt{z}^+ prennent des expressions différentes.

2. Solutions particulières de l'équation homogène.

Par unicité locale du problème de Cauchy pour les équations linéaires, il est clair que toute solution distribution u de (3.1.5) dans laquelle $f \equiv 0$ coïncide respectivement sur \mathbb{R}_-^* et \mathbb{R}_+^* avec des solutions maximales sur \mathbb{R} de l'équation

$$-u'' - zu = 0, \quad (3.1.7)$$

et de

$$-u'' - Bu - zu = 0. \quad (3.1.8)$$

Cela donne *a priori* une famille à quatre paramètres de solutions. Comme l'ensemble de ces solutions sont $H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R})$ par ellipticité, la condition de raccord C^1 en $x = 0$ montre qu'en fait elles forment un espace vectoriel de dimension au plus 2. Pour des raisons qui apparaîtront claires dans la partie 5.1 du chapitre 5, on considèrera des solutions particulières avec la normalisation suivante :

■ **3.2. Définition.** Pour $B > 0$ et z non réel, on introduit les fonctions u_{\pm} , définies sur \mathbb{R} par

$$u_+(x) := \begin{cases} e^{-i\sqrt{z+B^+}x} + r_+(z)e^{i\sqrt{z+B^+}x} & \text{si } x > 0 \\ t_+(z)e^{-i\sqrt{z^+}x} & \text{si } x \leq 0, \end{cases}$$

et

$$u_-(x) := \begin{cases} t_-(z)e^{i\sqrt{z+B^+}x} & \text{si } x > 0 \\ e^{i\sqrt{z^+}x} + r_-(z)e^{-i\sqrt{z^+}x} & \text{si } x \leq 0, \end{cases}$$

où pour z fixé, les constantes $r_{\pm}(z), t_{\pm}(z)$ sont déterminées par la condition : u est C^1 en $x = 0$.

3.3. Remarque. Ainsi par un calcul explicite on a

$$t_+(z) = \frac{2}{B} \sqrt{z+B^+} (\sqrt{z+B^+} - \sqrt{z^+}) \quad (3.1.9)$$

$$t_-(z) = \frac{2}{B} \sqrt{z^+} (\sqrt{z+B^+} - \sqrt{z^+}) \quad (3.1.10)$$

$$r_{\pm}(z) = t_{\pm}(z) - 1. \quad (3.1.11)$$

Noter que le produit $t_+(z)t_-(z)$ est non nul. De plus, $r_{\pm}(z)$ prend l'expression plus symétrique suivante

$$r_+(z) = \frac{\sqrt{z+B^+} - \sqrt{z^+}}{\sqrt{z+B^+} + \sqrt{z^+}}, \quad r_-(z) = \frac{\sqrt{z^+} - \sqrt{z+B^+}}{\sqrt{z^+} + \sqrt{z+B^+}}, \quad (3.1.12)$$

où on a utilisé que $B = \left(\sqrt{z+B^+}\right)^2 - \left(\sqrt{z^+}\right)^2$. On a également les propriétés suivantes pour z non réel

- (a) $u_{\pm} \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R})$.
- (b) $-u_{\pm}'' + \mathcal{B}_{\infty} \cdot u_{\pm} = zu_{\pm}$ au sens des distributions.
- (c) $u_+(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0$ et $u_+ \in H^2(\mathbb{R}_-)$.
- (d) $u_-(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} 0$ et $u_- \in H^2(\mathbb{R}_+)$.
- (e) $[u_+, u_-] := \begin{vmatrix} u_+(x) & u_-(x) \\ u_+'(x) & u_-'(x) \end{vmatrix} = 2it_+(z)\sqrt{z^+} = 2it_-(z)\sqrt{z+B^+}$.

Pour la dernière propriété en effet, il suffit de voir que le wronskien est une fonction continue sur \mathbb{R} et dérivable sur \mathbb{R} de dérivée nulle, puis de le calculer en un point. On a alors le résultat suivant

■ **3.4. Proposition.** *Pour $z \in \mathbb{C} - \mathbb{R}$, la fonction de Green de l'opérateur H_B est donnée par la formule suivante :*

$$R_B(z; x, y) = -\frac{1}{[u_+, u_-]} [\mathbb{1}_{y \geq x} u_+(x) u_-(y) + \mathbb{1}_{y \leq x} u_-(x) u_+(y)].$$

Preuve. C'est une simple vérification compte tenu de (3.1.4) : appelons w_y le second membre dans la formule ci-dessus. Fixons $y \in \mathbb{R}$, et calculons $-[u_+, u_-](H_B - z)w_y$; dérivant au sens des distributions, on obtient

$$\begin{aligned} -[u_+, u_-]\partial_x w_y &= -u_-(y)u_+(y)\delta_y + \mathbb{1}_{(-\infty; y]} u_-(y)u'_+ \\ &\quad + u_+(y)u_-(y)\delta_y + \mathbb{1}_{[y; +\infty)} u_+(y)u'_- \\ &= \mathbb{1}_{(-\infty; y]} u_-(y)u'_+ + \mathbb{1}_{[y; +\infty)} u_+(y)u'_-, \end{aligned}$$

et il s'agit bien d'une fonction H^1 . Similairement

$$\begin{aligned} -[u_+, u_-]\partial_x^2 w_y &= [u_+, u_-]\delta_y + u_-(y)\mathbb{1}_{[y; +\infty)} u''_+ \\ &\quad + u_+(y)\mathbb{1}_{(-\infty; y]} u''_-. \end{aligned}$$

Utilisant le point (b) de la remarque précédente, on a bien finalement

$$-[u_+, u_-]\partial_x^2 w_y = [u_+, u_-]\delta_y - [u_+, u_-](\mathcal{B}_\infty - z)w_y,$$

et par suite $R_B(z; x, y) = w_y(x)$. ■

3.5. Remarque. Puisque pour tout z non réel, et à y fixé, $x \mapsto R_B(z; x, y)$ est une fonction H^1 , on déduit de la relation $\overline{R_B(z; x, y)} = R_B(\bar{z}; y, x)$ que pour toute fonction f dans L^2 , et pour tout x réel, l'intégrale

$$\int_{y \in \mathbb{R}} R_B(z; x, y) f(y) dy$$

a un sens, l'intégrande étant le produit de deux fonctions L^2 , donc une fonction L^1 . Par suite, $R_B(z)$ est bien un opérateur intégral. En outre, une utilisation des théorèmes de Morera et de Fubini fournit que la solution de (3.1.5), donnée par l'intégrale ci-dessus dépend elle-même analytiquement de $z \in \mathbb{C} -]-B; \infty[$.

3.1.2 Principe d'absorption limite pour le saut de potentiel

C'est un corollaire de ce qui précède. On énonce avant de le démontrer :

■ **3.6. Proposition.** *Pour $s > 1/2$, la fonction définie pour $z \in \Omega_{\pm}$ par*

$$z \in \Omega_{\pm} \longrightarrow L^2(\mathbb{R}), \quad z \mapsto \langle x \rangle^{-s} R_B(z) \langle x \rangle^{-s}$$

est à valeurs Hilbert-Schmidt, holomorphe sur Ω_{\pm} , et continue sur $\overline{\Omega}_{\pm} \setminus \{0, -B\}$ en norme Hilbert-Schmidt.

3.7. Remarque. Il revient au même de dire que pour $\lambda \in \mathbb{R}^*$, $\lambda \neq -B$, les valeurs aux bord de la résolvante opèrent entre les espaces à poids¹ $L^2(\mathbb{R}, \langle x \rangle^{2s} dx)$ et $L^2(\mathbb{R}, \langle x \rangle^{-2s} dx)$. Noter par ailleurs que $L^2(\mathbb{R}, \langle x \rangle^{2s} dx)$ est un sous-espace dense de $L^2(\mathbb{R})$.

■ **3.8. Notation.** *On pose pour $\lambda \in \mathbb{R}^*$, $\lambda \neq -B$,*

$$(H_B - (\lambda \pm i0))^{-1} := s - \lim_{\varepsilon \xrightarrow{>} 0} (H_B - (\lambda \pm i\varepsilon))^{-1},$$

définie sur $L^2(\mathbb{R}, \langle x \rangle^{2s} dx)$.

Preuve. Il revient au même d'étudier les propriétés du noyau suivant

$$(x, y) \xrightarrow{G_B} \langle x \rangle^{-s} R_B(z; x, y) \langle y \rangle^{-s}.$$

■ **3.9. Lemme.** *Pour $z \in \mathbb{C}$ quelconque, le noyau $G_B(z; x, y)$ est un élément $L^2(dx \otimes dy)$ et définit une application holomorphe sur Ω_{\pm} , continue sur $\overline{\Omega}_{\pm}$.*

Preuve. Puisque $\overline{G_B(x, y; z)} = G_B(y, x; \bar{z})$, on examine le caractère L^2 en partitionnant le plan (x, y) en les ensembles dessinés sur la figure 3.4. On conclut à l'aide de l'expression du noyau (proposition 3.4) qui est alors $\mathcal{O}(\langle x \rangle^{-s} \langle y \rangle^{-s})$ localement uniformément en z , les fonctions $t_{\pm}(z)$, $r_{\pm}(z)$ étant elles-mêmes bornées d'après (3.1.9)-(3.1.11). Quant à l'holomorphie, il suffit de vérifier la faible holomorphie ([ReSi1] p.189), qui est encore une conséquence immédiate des théorèmes de Fubini et Morera, l'intégrande dépendant elle-même holomorphiquement de z . ■

Il est courant que le principe d'absorption limite fournisse en sous-produit le résultat d'absence de spectre singulier :

¹Rappelons que par définition $\langle x \rangle = (1 + x^2)^{1/2}$.

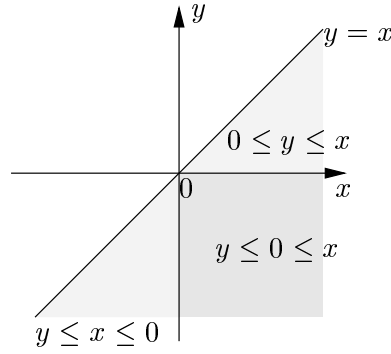


Figure 3.4. Le noyau symétrique de la résolvante est borné.

■ **3.10. Corollaire.** On a

$$\sigma(H_B) = \sigma_{ac}(H_B) = \sigma_{ess}(H_B) = [-B; \infty).$$

Preuve. Comme $B_\infty \geq -B$, on a l'inclusion $\sigma(H_B) \subset [-B; \infty)$, tandis que l'utilisation de la formule de Stone et du principe d'absorption limite (proposition 3.6) permet de calculer explicitement la résolution spectrale de H_B (voir la preuve du corollaire 4.9 page 54 où un calcul identique est détaillé). Cela donne alors que

$$\sigma_{ac}(H_B) \supset]-B; \infty) - \{0\}.$$

On déduit donc que

$$\sigma_{sc}(H_B) \subset \{-B, 0\}.$$

Par suite $\sigma_{sc}(H_B) = \emptyset$. Il est en outre facile de voir que H_B ne possède pas de valeur propre en résolvant explicitement l'équation aux valeurs propres, ce qui dit que $\sigma_{pp}(H_B) = \emptyset$, et que H_B n'a que du spectre continu. ■

3.11. Remarque. Le résultat est bien entendu valable pour $h > 0$ quelconque. Il suit que l'opérateur $H_\infty(h)$ (cf. chapitre 1, notation 1.8) jouit des mêmes propriétés. En particulier, d'après le théorème de Kato, on a également, comme annoncé dans le chapitre 1, éq. (1.2.1) :

$$\sigma_{ess}(H(h)) = [-B; \infty).$$

3.2 Principe d'absorption limite pour $H = H_\infty + V$

Dans cette partie, on établit également un principe d'absorption limite pour l'opérateur $H(1) = H_\infty(1) + \mathcal{V}^1$ (h est toujours égal à 1). Ensuite, on calcule sa résolution spectrale, ce qui permet d'une part de déterminer la nature du spectre de $H(1)$ et de mettre en évidence l'existence d'un développement en fonctions

propres généralisées. On utilisera des techniques exposées dans [Ya1] p.15 et [Ya2] p.53 et suivantes.

3.12. Remarque. Ayant obtenu une expression exacte de la résolvante de H_B ainsi qu'un principe d'absorption limite, l'existence d'un développement en fonctions propres généralisées pour $H(1)$ est une conséquence du fait que $H(1)$ peut se voir comme perturbation à support compact de H_B . Cela dit, cet argument fournit l'existence d'un isomorphisme entre les sous-espaces absolument continus de ces opérateurs sans pour autant les identifier.

Il s'agit d'utiliser une formule de la résolvante adaptée. On part pour cela de la relation suivante

$$H_\infty(1) = \tau_b H_B \tau_b^*, \quad (3.2.1)$$

l'opérateur τ_b désignant l'isométrie de L^2 définie par $u \mapsto u(\cdot - b)$. Ainsi on a avec les notations du chapitre 1 (on a toujours $h = 1$) :

$$H(1) = \tau_b H_B \tau_b^* + \mathcal{V}^1. \quad (3.2.2)$$

3.13. Remarque. Avec les résultats de la section précédente, on a de façon évidente les résultats suivants :

1. Le noyau de la résolvante de $\tau_b H_B \tau_b^*$ est donné par :

$$G_b(x, y; z) = -\frac{1}{[u_+, u_-]} [\mathbb{1}_{y \geq x} u_+^b(x) u_-^b(y) + \mathbb{1}_{y \leq x} u_-^b(x) u_+^b(y)],$$

où les fonctions u_\pm^b sont définies par $u_\pm^b := \tau_b u_\pm$.

2. $\sigma = \sigma_{ac} = \sigma_{ess} = [-B; \infty)$.
3. D'après le principe d'absorption limite pour le saut de potentiel (proposition 3.6), pour $s > 1/2$, la fonction

$$z \mapsto \langle x \rangle^{-s} (\tau_b H_B \tau_b^* - z)^{-1} \langle x \rangle^{-s} = \langle x \rangle^{-s} \tau_b (H_B - z)^{-1} \tau_b^* \langle x \rangle^{-s}$$

est à valeurs Hilbert-Schmidt, holomorphe sur Ω_\pm , et continue sur $\overline{\Omega}_\pm$,

■ **3.14. Notation.** Soit $z \in \Omega$, et $s > 1/2$. On pose

$$\mathcal{R}_B^b(z) := \langle x \rangle^{-s} \tau_b R_B(z) \tau_b^* \langle x \rangle^{-s}, \quad \mathcal{R}(z) := \langle x \rangle^{-s} R(z; 1) \langle x \rangle^{-s}.$$

On a alors le résultat suivant (cf. [Ya1])

■ **3.15. Proposition.** Pour $z \in \mathbb{C} - \mathbb{R}$, et $s > 1/2$, l'opérateur borné $A_s(z)$ défini par

$$A_s(z) := 1 + \mathcal{R}_B^b(z) \langle x \rangle^{2s} \mathcal{V}$$

est inversible et on a

$$\mathcal{R}(z) = A_s(z)^{-1} \mathcal{R}_B^b(z).$$

De plus, la fonction du membre de droite est à valeurs Hilbert-Schmidt, holomorphe sur Ω_\pm , continue sur $\overline{\Omega}_\pm - \{-B, 0\}$.

Preuve.

1. On part de l'identité résolvante, découlant de (3.2.2) :

$$R(z; 1) = \tau_b R_B(z) \tau_b^* - \tau_b R_B(z) \tau_b^* \mathcal{V} R(z; 1),$$

que l'on multiplie droite et gauche par $\langle x \rangle^{-s}$, ce qui donne ensuite

$$(1 + \mathcal{R}_B^b(z) \langle x \rangle^{2s} \mathcal{V}) \mathcal{R}(z) = \mathcal{R}_B^b(z).$$

On remarque alors que l'opérateur $\mathcal{R}_B^b(z)$ étant de classe Hilbert-Schmidt (c'est le point 3 de la remarque précédente), il est compact. Il suffit donc de prouver que -1 n'est pas valeur propre de $\mathcal{R}_B^b(z) \langle x \rangle^{2s} \mathcal{V}$, ce qui montrera que l'inverse de la proposition a bien un sens pour z non réel. Si u est une solution L^2 non triviale de l'équation

$$f + \mathcal{R}_B^b(z) \langle x \rangle^{2s} \mathcal{V} \cdot f = 0, \quad (3.2.3)$$

en posant

$$w(z) := \mathcal{R}_B^b(z) \langle x \rangle^s \mathcal{V} f, \quad (3.2.4)$$

qui a bien un sens, et est H^2 puisque $\langle x \rangle^s \mathcal{V} f \in L^2$, un calcul direct donne, utilisant (3.2.3)

$$H(1)w(z) = zw(z). \quad (3.2.5)$$

Comme z n'est pas réel et $H(1)$ auto-adjoint, cela donne $w(z) \equiv 0$, puis $\mathcal{V}f = 0$ et enfin $f = 0$ par (3.2.3).

2. Pour obtenir le deuxième point du lemme (qui donnera le principe d'absorption limite) on prouve le résultat suivant :

■ **3.16. Lemme.** Soit \mathcal{N}_\pm l'ensemble des $\lambda \in \mathbb{R}^*$, $\lambda \neq -B$ tels que l'opérateur $1 + \mathcal{R}_B^b(\lambda \pm i0) \langle x \rangle^{2s} \mathcal{V}$ n'est pas inversible. Alors

$$\mathcal{N}_+ = \mathcal{N}_- = \emptyset.$$

Preuve. Puisque les opérateurs $\mathcal{R}_B^b(\lambda \pm i0)$ sont compacts, la non-inversibilité de $1 + \mathcal{R}_B^b(\lambda \pm i0)\langle x \rangle^{2s}\mathcal{V}$ équivaut à sa non-injectivité. Pour une solution f non triviale de l'équation sous-jacente (3.2.3) dans laquelle $z = \lambda \pm i0$, considérons la fonction $w(z) \in L^2 \cap H_{\text{loc}}^2$ définie en (3.2.4). Le calcul conduisant à (3.2.5) se traduit en termes d'équations différentielles par

$$P(1)w(\lambda \pm i0) = \lambda w(\lambda \pm i0),$$

et en dehors de $]a; b[$, puisque $w(z)$ est L^2 , une résolution explicite donne, en ne conservant que les modes exponentiels admissibles, et pour des constantes complexes $\alpha_{\pm}, \beta_{\pm}$ convenables ($\text{Im } \sqrt{z}^+ > 0$!):

$$w(\lambda \pm i0) = \begin{cases} \beta_{\pm} e^{\pm i\sqrt{\lambda \pm i0 + B}^+ x} & x \geq b \\ \alpha_{\pm} e^{\pm i\sqrt{\lambda \pm i0}^+ x} & x \leq a. \end{cases} \quad (3.2.6)$$

Il est bon de noter que ces problèmes se reformulent comme problèmes aux limites sur $]a; b[$ (cf. figure 3.3), par :

$$(P(1) - \lambda)w(\lambda \pm i0) = 0 \quad \text{et} \quad \begin{cases} w'(a) - i\sqrt{\lambda \pm i0}^+ w(a) = 0 \\ w'(b) + i\sqrt{\lambda + B \pm i0}^+ w(b) = 0. \end{cases} \quad (3.2.7)$$

On verra dans la proposition 7.17 p.83 que ces problèmes homogènes n'admettent pas de solutions non triviales. Par suite $w(\lambda \pm i0) = 0$ et $f = 0$. ■

■ **3.17. Corollaire.** Pour $\lambda \in \Omega_{\pm}$, la fonction

$$z \mapsto \langle x \rangle^{-s} R(z; 1) \langle x \rangle^{-s}$$

est à valeurs Hilbert-Schmidt, holomorphe sur Ω_{\pm} , continue jusqu'au bord sauf en $\lambda = -B$ et $\lambda = 0$.

Preuve. C'est un corollaire des propositions 3.6 et 3.15. ■

■ **3.18. Corollaire.** Pour tout compact $K \subset \mathbb{R}$, la résolution spectrale en restriction à K :

$$]-B; \infty] - \{0\} \ni \lambda \mapsto \mathbb{1}_K \frac{\partial E}{\partial \lambda}(\lambda) \mathbb{1}_K$$

est une fonction continue à valeurs Hilbert-Schmidt.

Preuve. Il suffit de remarquer que pour tout $z \in \mathbb{C} - \mathbb{R}$,

$$\mathbb{1}_K R(z; 1) \mathbb{1}_K = \mathbb{1}_K \langle x \rangle^s \cdot [\langle x \rangle^{-s} R(z; 1) \langle x \rangle^{-s}] \cdot \langle x \rangle^s \mathbb{1}_K.$$

Appliquant ensuite la formule de Stone, cf. (1.2.3), et le corollaire précédent, on a le résultat, l'opérateur $\mathbb{1}_K \langle x \rangle^s$ étant borné, et par stabilité de l'idéal Hilbert-Schmidt par multiplication. ■

■ **3.19. Corollaire.** *Pour toute fonction continue $f \in C_c^0(\mathbb{R}^* - \{-B\})$, et $K \subset \mathbb{R}$ un compact, l'opérateur $f(H(h)) \mathbb{1}_K$ est de type Hilbert-Schmidt.*

Preuve. Appliquer le corollaire précédent. ■

Résolution spectrale. Absence de spectre singulier

On donne ici une expression exploitable de la résolution spectrale du Hamiltonien $H(h)$. Celle-ci permet d'identifier son spectre. La question de l'absence de spectre singulier est naturelle dans l'étude d'opérateurs de Schrödinger. En effet, si H est le Hamiltonien d'un système quantique (par exemple celui d'un électron en interaction avec un proton), le spectre discret décrit les états liés de l'électron, tandis que le spectre absolument continu ne décrit les états de diffusion. Le spectre singulier continu ne traduit pas de situation pertinente dans notre contexte. Il est donc important de traiter la question du spectre singulier.

Comme dans le cas du saut de potentiel (sections 3.1-3.2 du chapitre précédent), une façon de procéder consiste à calculer explicitement la résolution spectrale et d'identifier alors les sous-espaces spectraux absolument continu, propre, etc. Le principe d'absorption limite ayant été établi dans la section 2.3 du chapitre précédent, il suffit d'obtenir une formule exploitable pour la résolvante. C'est ce que l'on fait dans la suite.

4.1 Fonction de Green

On reprend les calculs faits pour H_B . À cet effet on s'intéresse pour z non réel aux solutions distributions v de l'équation

$$P(1)v = zv, \quad (4.1.1)$$

qui sont, à cause de la régularité du potentiel, de classe C^1 sur \mathbb{R} , et C^2 sur $\mathbb{R} - \{a, b\}$. Il est raisonnable, puisque les opérateurs P et P_∞ ne diffèrent que sur I

d'en chercher *a priori* des solutions particulières sous la forme

$$v_{\pm} := \tau_b u_{\pm} + \varphi_{\pm}, \quad (4.1.2)$$

les fonctions φ_{\pm} étant à déterminer, les fonction u_{\pm} ayant été introduites dans la définition 3.2. On remarque dans ce cas que d'après (3.2.2) et (3.2.1), φ_{\pm} vérifie l'équation² au sens des distributions :

$$\left[\tau_b \left(-\frac{d^2}{dx^2} + \mathcal{B}_{\infty} \right) \tau_b^* + \mathcal{V}^1 - z \right] \varphi_{\pm} = -\mathcal{V}^1 \tau_b u_{\pm}. \quad (4.1.3)$$

Le second membre de cette équation étant une fonction L^2 , on obtient par suite en se souvenant de (3.1.1) et de nouveau par (3.2.2) :

$$\varphi_{\pm} = -R(z; 1) \mathcal{V}^1 \tau_b u_{\pm}, \quad (4.1.4)$$

et φ_{\pm} sont donc des fonctions H^2 . Il est facile de résoudre l'équation ci-dessus en dehors de $[a; b]$, ce qui donne de façon générale pour les fonctions φ_{\pm} :

$$\begin{aligned} & \alpha_{\pm} \exp \left(i\sqrt{z}^+ \cdot x \right) + \beta_{\pm} \exp \left(-i\sqrt{z}^+ \cdot x \right), \quad x \rightarrow -\infty, \quad \alpha_{\pm}, \beta_{\pm} \in \mathbb{C} \\ & \alpha'_{\pm} \exp \left(i\sqrt{z+B}^+ \cdot x \right) + \beta'_{\pm} \exp \left(-i\sqrt{z+B}^+ \cdot x \right), \quad x \rightarrow +\infty, \quad \alpha'_{\pm}, \beta'_{\pm} \in \mathbb{C}. \end{aligned}$$

La condition $\varphi_{\pm} \in L^2$ permet d'éliminer les modes exponentiellement croissants, ainsi $\alpha_{\pm} = \beta'_{\pm} = 0$. Cela donne, compte tenu de (4.1.2) et de la définition 3.2 de u_{\pm} :

$$v_+(x) = \begin{cases} e^{-i\sqrt{z+B}^+ x} + \rho_+(z) e^{i\sqrt{z+B}^+ x} & \text{si } x > b \\ \tau_+(z) e^{-i\sqrt{z}^+ x} & \text{si } x \leq a, \end{cases} \quad (4.1.5)$$

$$v_-(x) = \begin{cases} \tau_-(z) e^{i\sqrt{z+B}^+ x} & \text{si } x > b \\ e^{i\sqrt{z}^+ x} + \rho_-(z) e^{-i\sqrt{z}^+ x} & \text{si } x \leq a, \end{cases} \quad (4.1.6)$$

pour des constantes ρ_{\pm}, τ_{\pm} , déterminées par la condition $\varphi_{\pm} \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R})$.

Il est également bon de noter les points suivants :

1. D'après (4.1.2), (4.1.4) et le principe d'absorption limite, les distributions v_{\pm} dépendent holomorphiquement de z et possèdent des valeurs au bord au moins au sens des distributions.³ Ainsi, pour $\lambda \in \mathbb{R}^*$, $\lambda \neq -B$, on peut parler des quatre fonctions $v_{\pm}(\lambda \pm i0)$, toutes les quatre solutions au sens des distributions de l'équation à coefficients réels

$$P(1)v \equiv -v'' + (\mathcal{V}^1 + \mathcal{B})v = \lambda v, \quad \lambda \in \mathbb{R}^*, \quad \lambda \neq -B. \quad (4.1.7)$$

²Il s'agit de l'équation de Lippmann-Schwinger, cf. [ReSi3], p. 98.

³On peut le voir plus simplement d'après l'expression de v_{\pm} et le fait que les fonctions τ_{\pm} et ρ_{\pm} sont méromorphes.

2. Les propriétés (a)-(e) énoncées en remarque 2, page 36 sont vérifiées en remplaçant H_B par $H(1)$, u_{\pm} par v_{\pm} et t_{\pm} par τ_{\pm} .
3. En particulier, les fonctions $\tau_+(z)$ et $\tau_-(z)$ admettent des valeurs aux bord sauf pour $\lambda \in \{-B; 0\}$. De plus, d'après la propriété (e) du Wronskien, pour $z \in \overline{\Omega}_{\pm}$, $\tau_+ \tau_-(z) \neq 0$, sinon quoi v_+ et v_- seraient des fonctions proportionnelles, ce qui n'est pas possible compte tenu de la normalisation (4.1.5)-(4.1.6) adoptée.

La dernière remarque permet de définir les fonctions suivantes :

■ **4.1. Définition.** *Pour z non réel, on introduit les fonctions H_{loc}^2 suivantes :*

$$\Psi_+(z, \cdot) := \frac{1}{\tau_+(z)} v_+(z, \cdot), \quad \text{et } \Psi_-(z, \cdot) := v_-(z, \cdot). \quad (4.1.8)$$

On a en particulier $[\Psi_+(z, \cdot), \Psi_-(z, \cdot)] = 2i\sqrt{z}^+$.

Rappelons que la notation ci-dessus désigne le Wronskien de $\Psi_+(z, \cdot)$ et de $\Psi_-(z, \cdot)$. Il a en effet la propriété d'être constant à z donné. Plus généralement :

■ **4.2. Lemme.** *Soit $z \notin \mathbb{R}$. Le Wronskien $[\Psi_+(z, \cdot), \Psi_-(z, \cdot)]$ est constant. De plus, pour $\lambda \in \mathbb{R}^*$, $\lambda \neq -B$, les quatre fonctions $\Psi_{\pm}(\lambda \pm i0, \cdot)$ sont bien définies. Enfin, le Wronskien de deux quelconques d'entre les fonctions $\Psi_{\pm}(\lambda \pm i0, \cdot)$ est constant.*

Preuve. En effet, pour z non réel, les Ψ vérifient l'équation différentielle (4.1.1). Par régularité des Ψ , le Wronskien est une fonction dérivable sur $\mathbb{R} - \{a, b\}$, de dérivée nulle. Ainsi il est constant. D'autre part, pour z réel, $z \notin \{-B, 0\}$, les points 1 et 3 de la dernière remarque permettent de parler des fonctions $\Psi_{\pm}(\lambda \pm i0)$, également solutions de (4.1.7). On conclut alors par les mêmes arguments. ■

Par suite on obtient la valeur du Wronskien en le calculant explicitement dans les régions non bornées de la droite réelle. Le fait suivant sera utile dans les calculs de la résolution spectrale :

■ **4.3. Lemme.** *Soit u une solution maximale non nulle de l'équation différentielle donnée par (4.1.7) avec $\lambda \geq -B$. Alors les zéros de u sont isolés.*

Preuve. La fonction u est en restriction à chacun des ensembles $\{x \leq a\}$, $\{a < x \leq b\}$, $\{x > b\}$ solution d'un problème de Cauchy classique. Il suffit ensuite de noter que si x_0 est un point d'accumulation dans l'ensemble $\{u = 0\}$, alors $u'(x_0) = 0$. Ainsi u vérifie un problème de Cauchy en x_0 avec données initiales nulles. Par unicité au problème de Cauchy, $u \equiv 0$ sur l'unique ensemble des trois ci-dessus contenant x_0 . Comme u est H_{loc}^2 par ellipticité, on déduit $u \equiv 0$ par continuation. ■

■ **4.4. Corollaire.** *L'opérateur $H(h)$ n'a pas de valeurs propres dans $[-B; \infty)$:*

$$\sigma_{pp}(H(h)) \subset (-\infty; -B[.$$

Preuve. En effet dans ce cas, un vecteur propre associé u étant dans L^2 , il est identiquement nul pour $x \geq b$. On conclut avec le lemme précédent. ■

4.5. Remarque. On a vu que le spectre essentiel de $H(h)$ est précisément $[-B; \infty)$ (cf. corollaire 3.10 p.39). En particulier le corollaire précédent dit que $H(h)$ ne possède pas de valeurs propres plongées.

Enfin le même calcul que dans le cas de la marche de potentiel fournit le noyau de la résolvante :

■ **4.6. Proposition.** *Pour $z \in \mathbb{C}$, z non réel, le noyau de la résolvante de l'opérateur $H(1)$ est donné par*

$$R(x, y; z; 1) = -\frac{1}{[\Psi_+, \Psi_-]} [\mathbb{1}_{y \geq x} \Psi_+(x) \Psi_-(y) + \mathbb{1}_{y \leq x} \Psi_-(x) \Psi_+(y)].$$

4.2 Résolution spectrale

On peut à présent calculer la résolution spectrale de $H(1)$.

■ **4.7. Proposition.** *Soit $\lambda > -B$, $\lambda \neq 0$. La résolution spectrale de $H(1)$ est donnée par*

$$\begin{aligned} dE(\lambda)[x, y] &= \frac{1}{2\pi} v_+(\lambda + i0, x) \overline{v_+(\lambda + i0, y)} \frac{d\lambda}{2\sqrt{\lambda + B}} \\ &+ \frac{1}{2\pi} v_-(\lambda + i0, x) \overline{v_-(\lambda + i0, y)} \mathbb{1}_{\lambda > 0} \frac{d\lambda}{2\sqrt{\lambda}}. \end{aligned}$$

Preuve. D'après la formule de Stone et le principe d'absorption limite (corollaire 3.17 p.42), on a :

$$dE(\lambda)[x, y] = \frac{1}{2i\pi} [R(\lambda + i0; x, y; 1) - R(\lambda - i0; x, y; 1)], \quad \lambda \in \mathbb{R}^*, \lambda > -B.$$

Avec la dernière proposition, cela donne :

$$\begin{aligned} dE(\lambda) &= \mathbb{1}_{y \geq x} \frac{\Psi_+(\lambda + i0; x) \Psi_-(\lambda + i0; y)}{4\pi \sqrt{\lambda + i0}^+} + \mathbb{1}_{y \leq x} \frac{\Psi_-(\lambda + i0; x) \Psi_+(\lambda + i0; y)}{4\pi \sqrt{\lambda + i0}^+} \\ &\quad - \mathbb{1}_{y \geq x} \frac{\Psi_+(\lambda - i0; x) \Psi_-(\lambda - i0; y)}{4\pi \sqrt{\lambda - i0}^+} - \mathbb{1}_{y \leq x} \frac{\Psi_-(\lambda - i0; x) \Psi_+(\lambda - i0; y)}{4\pi \sqrt{\lambda - i0}^+}. \end{aligned}$$

Et finalement

$$\begin{aligned} 4\pi dE(\lambda) &= \mathbb{1}_{y \geq x} \left[\frac{\Psi_+(\lambda + i0; x) \Psi_-(\lambda + i0; y)}{\sqrt{\lambda + i0}^+} - \frac{\Psi_+(\lambda - i0; x) \Psi_-(\lambda - i0; y)}{\sqrt{\lambda - i0}^+} \right] \\ &\quad + \mathbb{1}_{y \leq x} \left[\frac{\Psi_-(\lambda + i0; x) \Psi_+(\lambda + i0; y)}{\sqrt{\lambda + i0}^+} - \frac{\Psi_-(\lambda - i0; x) \Psi_+(\lambda - i0; y)}{\sqrt{\lambda - i0}^+} \right]. \end{aligned}$$

Il suffit ensuite de passer convenablement à la limite dans \sqrt{z}^+ (cf. figure 3.3). On distingue pour cela deux cas.

■ **Premier cas :** $\lambda \in]-B; 0[$. Dans ce cas on a

$$\sqrt{\lambda + i0}^+ = \sqrt{\lambda - i0}^+ = i\sqrt{|\lambda|}, \quad (4.2.1)$$

et la formule précédente se réécrit

$$\begin{aligned} 4i\pi\sqrt{|\lambda|}dE_\lambda &= \mathbb{1}_{y \geq x} [\Psi_+(\lambda + i0; x) \Psi_-(\lambda + i0; y) - \Psi_+(\lambda - i0; x) \Psi_-(\lambda - i0; y)] \\ &\quad + \mathbb{1}_{y \leq x} [\Psi_-(\lambda + i0; x) \Psi_+(\lambda + i0; y) - \Psi_-(\lambda - i0; x) \Psi_+(\lambda - i0; y)]. \end{aligned}$$

On souhaiterait factoriser chacun des termes entre crochets. Introduisons la notation suivante :

■ **4.8. Notation.** On pose, pour $\lambda \in [-B; +\infty[$, $\lambda \neq 0$,

$$K(\lambda; x, y) = \Psi_+(\lambda + i0; x) \Psi_-(\lambda + i0; y) - \Psi_+(\lambda - i0; x) \Psi_-(\lambda - i0; y). \quad (4.2.2)$$

Si bien que l'équation précédente s'écrit :

$$4i\pi\sqrt{|\lambda|}dE_\lambda = \mathbb{1}_{y \geq x} K(\lambda; x, y) + \mathbb{1}_{y \leq x} K(\lambda; y, x) \quad (4.2.3)$$

Commençons par le premier terme, le second se traitant en échangeant les rôles de x et y : remarquons dans ce cas que les fonctions $\Psi_\pm(\lambda \pm i0)$ prennent les expressions suivantes

$$\begin{aligned}
\Psi_+(\lambda + i0; x) &= \begin{cases} \frac{1}{\tau_+(\lambda + i0)} e^{-i\sqrt{\lambda+B}x} + \frac{\rho_+(\lambda + i0)}{\tau_+(\lambda + i0)} e^{i\sqrt{\lambda+B}x} & \text{si } x > b \\ e^{\sqrt{|\lambda|x}} & \text{si } x \leq a, \end{cases} \\
\Psi_+(\lambda - i0; x) &= \begin{cases} \frac{1}{\tau_+(\lambda - i0)} e^{i\sqrt{\lambda+B}x} + \frac{\rho_+(\lambda - i0)}{\tau_+(\lambda - i0)} e^{-i\sqrt{\lambda+B}x} & \text{si } x > b \\ e^{\sqrt{|\lambda|x}} & \text{si } x \leq a, \end{cases} \\
\Psi_-(\lambda + i0; x) &= \begin{cases} \tau_-(\lambda + i0) e^{i\sqrt{\lambda+B}x} & \text{si } x > b \\ e^{-\sqrt{|\lambda|x}} + \rho_-(\lambda + i0) e^{\sqrt{|\lambda|x}} & \text{si } x \leq a, \end{cases} \\
\Psi_-(\lambda - i0; x) &= \begin{cases} \tau_-(\lambda - i0) e^{-i\sqrt{\lambda+B}x} & \text{si } x > b \\ e^{-\sqrt{|\lambda|x}} + \rho_-(\lambda - i0) e^{\sqrt{|\lambda|x}} & \text{si } x \leq a. \end{cases}
\end{aligned}$$

En considérant l'expression de $\Psi_+(\lambda \pm i0)$ pour $x \leq a$, on voit que ces deux fonctions coïncident. Avec le lemme 4.4, on déduit :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \Psi_+(\lambda + i0; x) = \Psi_+(\lambda - i0; x), \quad \lambda < 0, \quad \lambda \neq -B. \quad (4.2.4)$$

De même en regardant pour $x \geq b$, on obtient :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \Psi_+(\lambda + i0; x) = \overline{\Psi_+(\lambda - i0; x)}, \quad \lambda < 0, \quad \lambda \neq -B, \quad (4.2.5)$$

qui donne au passage⁴ en regardant pour $x \geq b$

$$\tau_+(\lambda + i0) = \overline{\tau_+(\lambda - i0)}. \quad (4.2.6)$$

Par ailleurs, on remarque que pour $y \leq a$, on a

$$\Psi_-(\lambda + i0; y) - \Psi_-(\lambda - i0; y) = [\rho_-(\lambda + i0) - \rho_-(\lambda - i0)] \Psi_+(\lambda + i0; y), \quad (4.2.7)$$

et le même argument que précédemment donne l'égalité sur \mathbb{R} . Il suit que (4.2.2) devient avec (4.2.4) et (4.2.7) :

$$K(\lambda; x, y) = [\rho_-(\lambda + i0) - \rho_-(\lambda - i0)] \Psi_+(\lambda + i0; x) \Psi_+(\lambda + i0; y), \quad (4.2.8)$$

forme symétrique sous laquelle on voit que

$$\forall x, y \in \mathbb{R}, \quad K(\lambda; x, y) = K(\lambda; y, x), \quad \lambda < 0, \quad \lambda \neq -B, \quad (4.2.9)$$

et (4.2.3) prend la forme plus simple

$$4i\pi\sqrt{|\lambda|}dE_\lambda = K(\lambda; x, y). \quad (4.2.10)$$

⁴En particulier la fonction $\Psi_+(\lambda + i0)$ est réelle pour $\lambda < 0$, et $\rho_+(\lambda + i0) = \frac{\tau_+(\lambda + i0)}{\tau_+(\lambda + i0)}$. C'est donc un nombre complexe de module 1.

On souhaite obtenir des expressions indépendantes des coefficients ρ_{\pm}, τ_{\pm} . Il suffit pour cela de calculer les Wronskiens de plusieurs façons différentes, et d'utiliser le lemme 4.2 : ainsi avec l'expression de Ψ_{-} pour $x \leq a$ on a

$$[\Psi_{-}(\lambda + i0;), \Psi_{-}(\lambda - i0;)] = -2\sqrt{|\lambda|}[\rho_{-}(\lambda + i0) - \rho_{-}(\lambda - i0)], \quad (4.2.11)$$

tandis que les expressions de ces fonctions pour $x \geq b$ donnent

$$[\Psi_{-}(\lambda + i0;), \Psi_{-}(\lambda - i0;)] = -2i\sqrt{\lambda + B}\tau_{-}(\lambda + i0)\tau_{-}(\lambda - i0), \quad (4.2.12)$$

soit

$$\rho_{-}(\lambda + i0) - \rho_{-}(\lambda - i0) = \frac{i\sqrt{\lambda + B}}{\sqrt{|\lambda|}}\tau_{-}(\lambda + i0)\tau_{-}(\lambda - i0) \quad (4.2.13)$$

On relie τ_{-} à τ_{+} en calculant de deux façons le Wronskien ci-dessous

$$\begin{aligned} [\Psi_{-}(\lambda + i0;), \Psi_{+}(\lambda + i0;)] & \underset{x \geq b}{=} -2i\sqrt{\lambda + B}^{+} \frac{\tau_{-}(\lambda + i0)}{\tau_{+}(\lambda + i0)} \\ & \underset{x \leq a}{=} 2\sqrt{|\lambda|}, \end{aligned}$$

et on obtient la relation suivante entre τ_{-} et τ_{+} :

$$\tau_{-}(\lambda + i0) = -\frac{\sqrt{|\lambda|}}{i\sqrt{\lambda + B}^{+}}\tau_{+}(\lambda + i0). \quad (4.2.14)$$

De même, en calculant le Wronskien $[\Psi_{-}(\lambda - i0;), \Psi_{+}(\lambda - i0;)]$ on trouve

$$\tau_{-}(\lambda - i0) = -\frac{\sqrt{|\lambda|}}{i\sqrt{\lambda + B}}\tau_{+}(\lambda - i0). \quad (4.2.15)$$

En combinant (4.2.13), (4.2.14) et (4.2.15), on obtient l'expression suivante de (4.2.8) :

$$K(\lambda; x, y) = -\frac{\sqrt{|\lambda|}}{i\sqrt{\lambda + B}}\tau_{+}(\lambda + i0)\Psi_{+}(\lambda + i0; x)\tau_{+}(\lambda - i0)\Psi_{+}(\lambda - i0; y),$$

ce qui donne pour la densité spectrale (4.2.10), en se souvenant de la normalisation de Ψ_{+} ,

$$dE(\lambda) = \frac{1}{4\pi\sqrt{\lambda + B}}v_{+}(\lambda + i0, x)\overline{v_{+}(\lambda + i0, y)}, \quad \lambda < 0, \quad \lambda \neq B. \quad (4.2.16)$$

Cela achève le premier cas. ■

■ **Second cas :** $\lambda > 0$. Dans ce cas

$$\sqrt{\lambda + i0}^{+} = -\sqrt{\lambda - i0}^{+} = \sqrt{|\lambda|}. \quad (4.2.17)$$

La densité spectrale est donnée par :

$$4\pi\sqrt{|\lambda|}dE_\lambda = \mathbb{1}_{y \geq x} K'(\lambda; y, x) + \mathbb{1}_{y \leq x} K'(\lambda; x, y) \quad \forall \lambda > 0, \quad (4.2.18)$$

où cette fois

$$K'(\lambda; x, y) := \Psi_-(\lambda + i0; x) \Psi_+(\lambda + i0; y) + \Psi_-(\lambda - i0; x) \Psi_+(\lambda - i0; y). \quad (4.2.19)$$

Noter que le projecteur dE_λ étant auto-adjoint, cela donne la relation de symétrie sur K' :

$$K'(\lambda; x, y) = \overline{K'(\lambda; y, x)} \quad \forall x, y \in \mathbb{R}, \quad \forall \lambda > 0. \quad (4.2.20)$$

Les fonctions Ψ prennent les expressions suivantes pour $\lambda > 0$:

$$\begin{aligned} \Psi_+(\lambda + i0; x) &= \begin{cases} \frac{1}{\tau_+(\lambda + i0)} e^{-i\sqrt{\lambda+B}x} + \frac{\rho_+(\lambda + i0)}{\tau_+(\lambda + i0)} e^{i\sqrt{\lambda+B}x} & \text{si } x > b \\ e^{-i\sqrt{\lambda}x} & \text{si } x \leq a, \end{cases} \\ \Psi_+(\lambda - i0; x) &= \begin{cases} \frac{1}{\tau_+(\lambda - i0)} e^{i\sqrt{\lambda+B}x} + \frac{\rho_+(\lambda - i0)}{\tau_+(\lambda - i0)} e^{-i\sqrt{\lambda+B}x} & \text{si } x > b \\ e^{i\sqrt{\lambda}x} & \text{si } x \leq a, \end{cases} \\ \Psi_-(\lambda + i0; x) &= \begin{cases} \tau_-(\lambda + i0) e^{i\sqrt{\lambda+B}x} & \text{si } x > b \\ e^{i\sqrt{\lambda}x} + \rho_-(\lambda + i0) e^{-i\sqrt{\lambda}x} & \text{si } x \leq a, \end{cases} \\ \Psi_-(\lambda - i0; x) &= \begin{cases} \tau_-(\lambda - i0) e^{-i\sqrt{\lambda+B}x} & \text{si } x > b \\ e^{-i\sqrt{\lambda}x} + \rho_-(\lambda - i0) e^{i\sqrt{\lambda}x} & \text{si } x \leq a, \end{cases} \end{aligned}$$

Ce qui donne en particulier

$$\Psi_+(\lambda - i0; \cdot) = \overline{\Psi_+(\lambda + i0; \cdot)}, \quad (4.2.21)$$

et aussi

$$\tau_+(\lambda - i0) = \overline{\tau_+(\lambda + i0)}, \quad \rho_+(\lambda - i0) = \overline{\rho_+(\lambda + i0)}. \quad (4.2.22)$$

Similairement, en échangeant les rôles de Ψ_- et Ψ_+ dans la normalisation par τ^{-1} , on obtient

$$\tau_-(\lambda - i0) = \overline{\tau_-(\lambda + i0)}, \quad \rho_-(\lambda - i0) = \overline{\rho_-(\lambda + i0)}, \quad (4.2.23)$$

et enfin

$$\Psi_-(\lambda - i0; \cdot) = \overline{\Psi_-(\lambda + i0; \cdot)}. \quad (4.2.24)$$

Les identités (4.2.21) et (4.2.24) donnent que le noyau K' est réel

$$K'(\lambda; x, y) = \overline{K'(\lambda; x, y)} \quad \forall x, y \in \mathbb{R}, \quad \forall \lambda > 0, \quad (4.2.25)$$

d'où l'on tire par (4.2.20)

$$K'(\lambda; x, y) = K'(\lambda; y, x) \quad \forall x, y \in \mathbb{R}, \quad \forall \lambda > 0, \quad (4.2.26)$$

puis avec (4.2.18)

$$4\pi\sqrt{|\lambda|}dE_\lambda = K'(\lambda; x, y) \quad \forall \lambda > 0. \quad (4.2.27)$$

Transformons à présent K' . On note que l'identité :

$$\Psi_-(\lambda - i0; y) - \Psi_+(\lambda + i0; y) = \rho_-(\lambda - i0)\Psi_+(\lambda - i0; y), \quad (4.2.28)$$

vraie pour $y \leq a$ est vraie pour tout y réel, si bien qu'en réinjectant cette expression de $\Psi_+(\lambda + i0; y)$ dans l'expression de $K'(\lambda; x, y)$, on trouve

$$\begin{aligned} K'(\lambda; x, y) &= \Psi_-(\lambda + i0; x)[\Psi_-(\lambda - i0; y) - \rho_-(\lambda - i0)\Psi_+(\lambda - i0; y)] \\ &\quad + \Psi_-(\lambda - i0; x)\Psi_+(\lambda - i0; y) \end{aligned}$$

puis en factorisant par $\Psi_+(\lambda - i0; y)$

$$\begin{aligned} K'(\lambda; x, y) &= \Psi_-(\lambda + i0; x)\Psi_-(\lambda - i0; y) \\ &\quad + [\Psi_-(\lambda - i0; x) - \rho_-(\lambda - i0)\Psi_-(\lambda + i0; x)]\Psi_+(\lambda - i0; y) \\ &= \Psi_-(\lambda + i0; x)\overline{\Psi_-(\lambda + i0; y)} \\ &\quad + [\Psi_-(\lambda - i0; x) - \rho_-(\lambda - i0)\Psi_-(\lambda + i0; x)]\overline{\Psi_+(\lambda + i0; y)} \end{aligned} \quad (4.2.29)$$

la dernière égalité découlant simplement de (4.2.21) et (4.2.24).

Or, on remarque que pour $x \leq a$, le terme entre crochets ci-dessus s'écrit

$$\Psi_-(\lambda - i0; \cdot) - \rho_-(\lambda - i0)\Psi_-(\lambda + i0; \cdot) = [1 - \rho_-(\lambda - i0)\rho_-(\lambda + i0)]\Psi_+(\lambda + i0; \cdot), \quad (4.2.30)$$

et l'identité est finalement valable sur \mathbb{R} .

De même que dans le cas précédent, on souhaite identifier le coefficient entre crochets de $\Psi_+(\lambda + i0; \cdot)$ dans (4.2.30). On calcule, d'après les expressions de v_+ (4.1.5)

$$\begin{aligned} [v_+(\lambda + i0, \cdot), v_+(\lambda - i0; \cdot)] &\underset{x \geq b}{=} 2i(1 - \rho_-(\lambda + i0)\rho_-(\lambda - i0))\sqrt{\lambda + B} \\ &\underset{x \leq a}{=} 2i\tau_+(\lambda + i0)\tau_+(\lambda - i0)\sqrt{\lambda}, \end{aligned}$$

d'où l'on tire

$$1 - \rho_-(\lambda + i0)\rho_-(\lambda - i0) = \tau_+(\lambda + i0)\tau_+(\lambda - i0)\frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda + B}}, \quad (4.2.31)$$

et qui donne, partant de (4.2.29) puis se souvenant de la normalisation de Ψ_{\pm} donnée en (4.1.8)

$$K'(\lambda; x, y) = v_-(\lambda + i0; x) \overline{v_-(\lambda + i0; y)} \quad (4.2.32)$$

$$+ \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda + B}} v_+(\lambda + i0; x) v_+(\lambda - i0; y). \quad (4.2.33)$$

On obtient la forme explicite suivante pour la résolution spectrale pour $\lambda > 0$:

$$\begin{aligned} dE(\lambda) &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{2\sqrt{\lambda + B}} v_+(\lambda + i0; x) \overline{v_+(\lambda + i0; y)} \\ &+ \frac{1}{2\pi} \frac{1}{2\sqrt{\lambda}} v_-(\lambda + i0; x) \overline{v_-(\lambda + i0; y)}, \quad \forall \lambda > 0. \end{aligned} \quad (4.2.34)$$

■

Cela donne l'expression des fonctions de l'énergie pour une fonction f continue à support compact dans $\mathbb{R} - \{-B, 0\}$:

$$\begin{aligned} f(H(1))(x, y) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\lambda > -B} f(\lambda) v_+(\lambda + i0, x) \overline{v_+(\lambda + i0, y)} \frac{d\lambda}{2\sqrt{\lambda + B}} \\ &+ \frac{1}{2\pi} \int_{\lambda > 0} f(\lambda) v_-(\lambda + i0, x) \overline{v_-(\lambda + i0, y)} \frac{d\lambda}{2\sqrt{\lambda}}. \end{aligned} \quad (4.2.35)$$

4.3 Spectre de H .

L'identification du spectre est alors assez directe :

■ **4.9. Corollaire.** *Le spectre continu de $H(h)$ est absolument continu.*

$$\sigma_c(H(h)) = \sigma_{ac}(H(h)), \quad i.e. \quad \sigma_{sc}(H(h)) = \emptyset.$$

Preuve. Le calcul précédent a été fait avec $h = 1$. Pour $h > 0$ quelconque, les calculs sont semblables à normalisation près. C'est un argument classique. Soit \mathcal{E} un domaine d'énergie inclus dans $] -B; \infty)$ ne contenant pas 0, et f une fonction continue à support compact dans \mathcal{E} . Comme pour $\lambda \in \mathcal{E}$ le calcul précédent est licite, on déduit que pour $s > 1/2$, et tout vecteur $u \in \mathcal{F} := L^2(x, \langle x \rangle^s) \cap L^2$, la mesure spectrale $d\mu_u$ associé à u est absolument continue en restriction à \mathcal{E} , puisqu'elle est donnée par

$$d\mu_{u|\mathcal{E}}(\lambda) = [\|v_+(\lambda + i0, \cdot)u\|^2 + \|v_-(\lambda + i0, \cdot)u\|^2 \cdot \mathbb{1}_{\lambda > 0}] d\lambda. \quad (4.3.1)$$

On observe ensuite la chaîne d'inclusions ci-dessous :

$$\mathcal{F} \subset \mathbb{1}_{\mathcal{E}}(H(h)) \cdot \mathcal{H} \subset \mathcal{H}_{\text{ac}} \subset L^2(\mathbb{R}).$$

Par densité du sous-espace \mathcal{F} dans $L^2(\mathbb{R})$, et le fait que le sous-espace absolument continu est fermé, on déduit, \mathcal{E} étant quelconque, que $\sigma_{\text{ac}}(H(h)) \supset]-B; \infty) - \{0\}$. Finalement $\sigma_{\text{sc}}(H(h)) \subset \{-B, 0\}$. Ainsi le spectre singulier est vide. ■

■ **4.10. Corollaire.** *les valeurs propres éventuelles de $H(h)$ sont dans $(-\infty; -B[$. De plus on a*

$$\sigma_{\text{ess}}(H(h)) = \sigma_{\text{ac}}(H(h)) = [-B; \infty).$$

Preuve. La première assertion découle du lemme 4.4. Par définition, on a en outre

$$\sigma(H(h)) = \sigma_c(H(h)) \cup \overline{\sigma_{\text{pp}}(H(h))}, \quad \text{et} \quad \sigma_c(H(h)) \subset \sigma_{\text{ess}}(H(h)).$$

D'après (3.2.2) et le corollaire 3.10, le théorème de Kato donne $\sigma_{\text{ess}}(H(h)) = [-B; \infty)$. On conclut avec le corollaire 4.9. ■

États de diffusion

Le calcul de la résolution spectrale du Hamiltonien $H(h)$ sous la forme donnée dans la proposition 4.6 décrit H comme une superposition à un paramètre continu de projecteurs de rang 1 en un sens faible puisque les fonctions en questions ne sont pas L^2 . En ce sens, on obtient une diagonalisation de $H(h)$ sur le spectre continu : ces fonctions jouent vis-à-vis du Hamiltonien $H(h)$ le même rôle que les caractères $e^{ikx/h}$ pour $-\hbar^2\Delta$. On va voir que les fonctions propres généralisées, ou états de diffusion, sont essentiellement un reparamétrage de la famille de projecteurs en question.

5.1 Définition. Relation de dispersion

Revenons sur les solutions de l'équation aux valeurs propres

$$H(1)\psi \equiv H_B\psi + \mathcal{V}^1\psi = \lambda\psi, \quad x \in \mathbb{R}, \quad \lambda \in [-B; \infty). \quad (5.1.1)$$

1. On a vu qu'en dehors de l'intervalle $[a; b]$ et pour $\lambda > 0$, (ou alors en dehors de $(-\infty; b]$ si $\lambda \in [-B; 0]$), les solutions de l'équation différentielle associée à (5.1.1) sont des ondes planes, c'est-à-dire de la forme e^{ikx} , $k \in \mathbb{R}^*$,
2. Par ailleurs, les fonctions $v_{\pm}(\lambda \pm i0)$ de (4.1.5)-(4.1.6) en sont des combinaisons particulières pour des valeurs admissibles de λ , cf. figure 5.1.
3. Il est commode de paramétrer les solutions de (5.1.1) par le vecteur d'onde (ou moment) k , $k \in \mathbb{R}^*$. Dans l'expression de la densité spectrale de $H(1)$, on a fait le choix de travailler avec les valeurs bord de la résolvante en provenant du demi-plan spectral supérieur. Du point de vue du scattering, cela revient à travailler avec des ondes planes entrantes au sens suivant : si l'on revient en effet aux expressions (4.1.5)-(4.1.6) des fonctions $v_{\pm}(\lambda \pm i0)$, on

remarque que celles-ci ont été choisies avec la normalisation suivante dans l'espace des phases :

$$v_{\pm}(\lambda(k) + i0) = 1 \cdot e^{ikx} + \rho e^{-ikx}, \quad |x| \gg 1, \quad (x, k) \in \{(x, \xi) \mid x \cdot \xi < 0\}, \quad (5.1.2)$$

où

$$\lambda(k) = \begin{cases} k^2 & \text{si } k > 0 \\ k^2 - B & \text{si } k < 0, \quad k^2 \neq B. \end{cases}$$

4. La région $\{x \cdot \xi < 0\}$ est appelée région entrante : dans la vision dynamique du problème, le potentiel jouant le rôle d'obstacle, la fonction v décrit une onde plane progressive d'énergie λ arrivant de la région entrante. Une partie est réfléchiée avec un taux ρ tandis qu'une partie est transmise avec un coefficient τ (cf. figure 5.2).
5. En dimension 1 il n'y a que deux directions d'incidence $k \in \mathbb{S}^0$. Ainsi dans la région entrante, on peut faire la dichotomie suivant que $k \leq 0$ avec v_{\mp} .

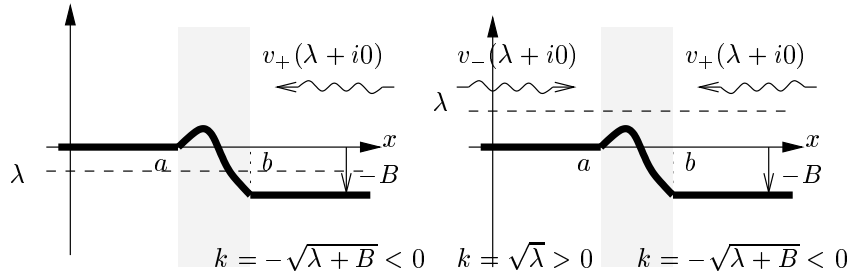


Figure 5.1. Forme asymptotique des ondes planes pour $H(1)$: les fonctions v_{\pm} sont des combinaisons normalisées dans l'espace des phases des ondes planes $e^{\pm ikx}$. Noter la dissymétrie des situations où $\lambda < 0$ (à gauche) et où $\lambda > 0$ (à droite).

6. Ainsi, pour résumer, en termes de k , les fonctions v_{\pm} sont solutions de

$$\begin{aligned} P(1)v_{\pm}(\lambda(k) + i0) &= \lambda(k)v_{\pm}(\lambda(k) + i0), \\ \text{avec } \lambda(k) &= \begin{cases} k^2 & \text{si } k > 0 \\ k^2 - B & \text{si } k < 0, \quad k^2 \neq B. \end{cases} \end{aligned} \quad (5.1.3)$$

La relation $k \mapsto \lambda = \lambda(k)$ s'appelle l'équation de dispersion : elle donne la distribution en énergie en fonction du moment.

■ **5.1. Définition.** La fonction définie par

$$k \mapsto \lambda(k) := \begin{cases} k^2 & \text{si } k > 0 \\ k^2 - B & \text{si } k < 0, \quad k^2 \neq B. \end{cases}$$

est appelée relation de dispersion.

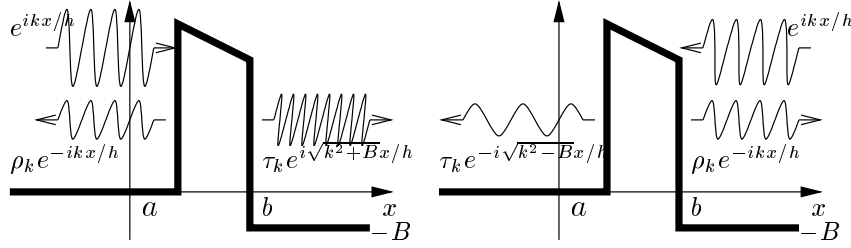


Figure 5.2. Réflexion de l'onde représentée par $v_+(\lambda, \cdot)$.

■ **5.2. Définition.** Pour $k \in \mathbb{R}$, et $\lambda(k) \neq 0$, on note $\psi_-(k, \cdot)$ l'unique solution distribution de l'équation $P(1)\psi_k = \lambda(k)\psi_k$ normalisée par la condition à l'infini (5.1.2). On l'appelle fonction propre généralisée entrante (ou état de diffusion) de l'Hamiltonien $H(1)$.

5.3. Remarque.

1. Noter que $\psi_-(k, \cdot) \in L^2(\mathbb{R}, \langle x \rangle^{2s} dx)$ pour $s > 1/2$.
2. Ainsi pour $k \geq 0$, on a $\psi_-(k, \cdot) = v_\pm(\lambda(k) + i0)$.
3. Il est à noter que, contrairement au cas où λ est une énergie négative, la valeur $\lambda > 0$ est atteinte pour deux valeurs distinctes du paramètre k : la région du spectre $\lambda \in \mathbb{R}_+^*$ est de multiplicité double (cf. figure 5.3), comme on peut le voir sur l'expression des fonctions de l'énergie.

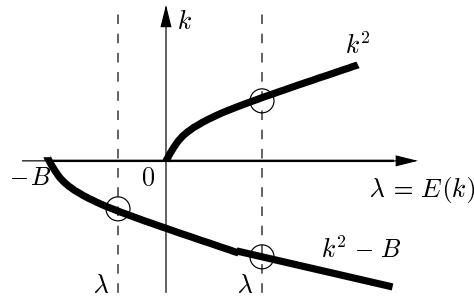


Figure 5.3. Relation de dispersion. Pour $\lambda \in]-B; 0[$, la multiplicité du spectre est simple tandis qu'elle est double pour $\lambda > 0$. Les valeurs $\lambda = -B$ et $\lambda = 0$ sont appelées seuils.

4. Les fonctions propres généralisées sortantes s'obtiennent en considérant les valeurs au bord de la résolvante en provenant du demi-plan complexe inférieur.

5.2 Fonctions du moment

Par définition, les fonctions du moment asymptotique $K_-(h)$ entrant sont les opérateurs donnés par

$$g(K_-(h))[x, y] \equiv \int_{k \in \mathbb{R}^*, \lambda(k) \neq 0} g(k) \psi_-(k, x) \overline{\psi_-(k, y)} \frac{dk}{2\pi h}. \quad (5.2.1)$$

Évidemment, dans le cas particulier où g est une fonction de l'énergie, c'est-à-dire $g(k) = f(\lambda(k))$, on s'attend à retrouver (4.2.35). C'est effectivement le cas, puisque la relation de dispersion donne :

$$\frac{d\lambda}{dk} = 2k,$$

et fait le lien entre (5.2.1) et (4.2.35). Si l'on garde en tête l'image de la situation physique sous-jacente, les fonctions g du moment k décrivent la densité en impulsion d'électrons hors-équilibre.

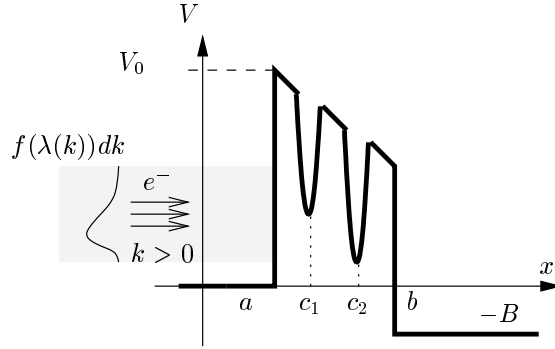


Figure 5.4. Le courant injecté en $x = a$ est décrit par la distribution $f(\lambda(k))dk$.

Dans notre problème, afin de modéliser le courant injecté dans la diode (par le point a , cf figure 5.4), il est naturel de s'intéresser à des fonctions supportées dans le domaine $\{k \in \mathbb{R}_+^*\}$. On étudiera le cas particulier où

$$g(k) := \mathbb{1}_{\{k \in \mathbb{R}_+^*\}} \cdot f(\lambda(k)) \quad (5.2.2)$$

et les fonctions du moment représentant un courant entrant s'écrivent alors :

$$g(K_-(1))[x, y] = \int_{k>0} f(k^2) \psi_-(k, x) \overline{\psi_-(k, y)} \frac{dk}{2\pi} \quad (5.2.3)$$

Cette expression explique pourquoi on emploie parfois la terminologie de transformation de Fourier généralisée pour la représentation ci-dessus.

Conditions aux bords transparentes

Dans le problème hors-équilibre que l'on étudie, on s'intéresse à des fonctions de la forme $g(k) \otimes \varphi(x)$, avec φ supportée dans I . La connaissance des états de diffusion sur I est ainsi suffisante. Il se trouve que la caractérisation des états de diffusion sur I se ramène à un problème aux limites non homogène sur $]a; b[$.

Dorénavant, $h > 0$ n'est plus fixé à l'unité.

6.1 Conditions à l'infini

Commençons par consigner les résultats sur l'asymptotique des fonctions $\psi_-(z, \cdot)$ du chapitre précédent dans la

■ **6.1. Proposition.** *La solution entrante $\psi_-(k, x)$ satisfait les conditions pour $k > 0$:*

$$\begin{aligned}\psi_-(k, x) &= e^{ikx/h} + \rho_k e^{-ikx/h} & x \leq a \\ \psi_-(k, x) &= \tau_k e^{i\sqrt{k^2+B}x/h}, & x \geq b\end{aligned}$$

et pour $k < 0$, $k^2 \neq B$:

$$\begin{aligned}\psi_-(k, x) &= e^{ikx/h} + \rho_k e^{-ikx/h} & x \geq b \\ \psi_-(k, x) &= \begin{cases} \tau_k e^{-i\sqrt{k^2-B}x/h}, & k^2 > B \\ \tau_k e^{\sqrt{B-k^2}x/h}, & k^2 < B \end{cases} & x \leq a,\end{aligned}$$

ρ_k et τ_k étant des constantes complexes uniquement déterminées.

6.2. Remarque.

1. Rappelons que les constantes ρ_k et τ_k sont en effet déterminées comme les valeurs au bord des fonctions $\rho_{\pm}(z)$ et $\tau_{\pm}(z)$ introduites dans (4.1.5)-(4.1.6). Noter également que pour $\lambda(k) > 0$, d'après la relation (4.2.31) p. 53 on a

$$\forall k, \quad \text{t.q.} \quad \lambda(k) > 0, \quad |\rho_k|^2 + \frac{\sqrt{\lambda(k)}}{\sqrt{\lambda(k) + B}} |\tau_k|^2 = 1, \quad (6.1.1)$$

à interpréter comme le fait que la matrice de diffusion du couple $(H_B(h); H(h))$ est une isométrie.

2. Ces conditions de radiation sont les versions unidimensionnelles des conditions de radiation de Bohr-Sommerfeld.

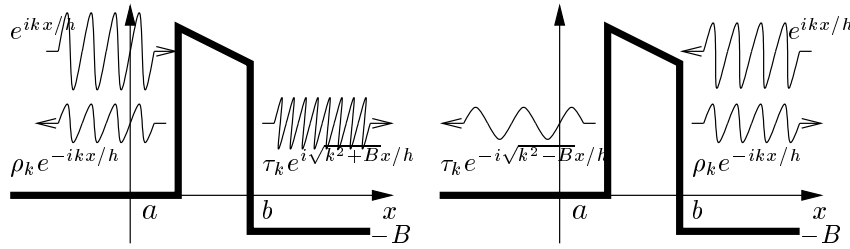


Figure 6.1. État de diffusion $\psi_{-}(k, x)$ pour $k > 0$, (à gauche) et pour $k < 0$, (à droite). Sur cet exemple, $\lambda(k) > 0$. D'après la relation de dispersion, les oscillations sont modulées suivant le sens de traversée de la barrière.

La caractérisation des états de diffusion en dimension 1 peut s'écrire de façon très simple en se ramenant à un opérateur défini sur I avec conditions aux limites adaptées. Commençons par introduire une autre détermination holomorphe de la racine carrée qui a l'avantage d'être définie au voisinage complexe de \mathbb{R}^* , ce qui sera utile dans le chapitre consacré aux résonances.

■ **6.3. Définition.** On introduit la fonction suivante

$$z^{1/2} := \begin{cases} \sqrt{z} & \text{si } \operatorname{Re}(z) > 0 \\ \sqrt{z}^+ & \text{si } \operatorname{Re}(z) < 0 \end{cases}, \quad (6.1.2)$$

qui est la détermination holomorphe de la racine carrée sur $\mathbb{C} - i\mathbb{R}_{-}$.

Regardons à présent comment s'écrivent les conditions aux limites : il suffit de remarquer que pour $k > 0$, ψ_{-} est en dehors de I de la forme annoncée si et seulement si ψ_{-} satisfait les relations suivantes :

$$iku(a) + hu'(a) = 2ike^{ika/h}, \quad i\sqrt{k^2 + B}u(b) - hu'(b) = 0. \quad (6.1.3)$$

Pour $k < 0$, les conditions correspondantes sont synthétisées par

$$i(k^2 - B)^{1/2}u(a) + hu'(a) = 0, \quad iku(b) + hu'(b) = 2ike^{ikb/h}. \quad (6.1.4)$$

Ainsi à l'aide de la relation de dispersion (5.1.3) p.58, en termes de λ , l'équation (6.1.3) est équivalente à :

$$i(\lambda(k))^{1/2}u(a) + hu'(a) = 2ike^{ika/h} \quad i(\lambda(k) + B)^{1/2}u(b) - hu'(b) = 0, \quad (6.1.5)$$

tandis que (6.1.4) équivaut à

$$i(\lambda(k))^{1/2}u(a) + hu'(a) = 0 \quad -i(\lambda(k) + B)^{1/2}u(b) + hu'(b) = 2ike^{ikb/h}. \quad (6.1.6)$$

6.2 Opérateur transparent. Problème affine de la diffusion

La dernière remarque motive l'introduction de l'opérateur suivant :

■ **6.4. Définition.** Soit $z \in \mathbb{C}^*$, $z \neq -B$, et soit $\mathbb{T}(z)$ l'application linéaire continue définie par :

$$\begin{aligned} \mathbb{T}(z) : H^2(a; b) &\longrightarrow \mathbb{C}^2, \\ u &\mapsto \left(hu'(a) + iz^{1/2}u(a); hu'(b) - i(z + B)^{1/2}u(b) \right). \end{aligned}$$

6.5. Remarque. Noter que la définition de $\mathbb{T}(z)$ est consistante puisque les injections de Sobolev en dimension 1 garantissent que pour $u \in H^2(a, b)$ les valeurs au bord de u et u' sont bien définies et dépendent continûment de u .

■ **6.6. Notation.** Notons pour z complexe $\mathcal{S}(z)$ l'ensemble des solutions sur $]a; b[$ de l'équation au sens des distributions

$$(P(h) - z)_{|(a; b)} u \equiv -h^2 u'' + (\mathcal{V}^h - z)u = 0.$$

On notera $\mathcal{T}(z)$ la restriction de $\mathbb{T}(z)$ à $\mathcal{S}(z)$.

6.7. Remarque. La théorie standard de Cauchy nous dit que $\mathcal{S}(z)$ est un espace vectoriel complexe de dimension 2. Par ailleurs, les éléments de $\mathcal{S}(z)$ sont H^2 sur $]a; b[$, si bien que l'on a les inclusions

$$\mathcal{S}(z) \subset H^2(a; b) \subset L^2, \quad \forall z \in \mathbb{C}.$$

L'application

$$\mathcal{T}(z) : \mathcal{S}(z) \longrightarrow \mathbb{C}^2, \quad u \mapsto \mathbb{T}(z)u$$

est donc bien définie et agit entre 2-plans. D'après les relations (6.1.5)-(6.1.6) on a donc

■ **6.8. Proposition.** *La fonction $\psi_-(k, \cdot)$ est, en restriction à I la solution du système affine d'inconnue u donné par :*

$$u \in \mathcal{S}(\lambda(k)), \quad \text{et} \quad \mathcal{T}(\lambda(k))u = (2ike^{ika/h}; 0), \quad \text{si } k > 0$$

$$u \in \mathcal{S}(\lambda(k)), \quad \text{et} \quad \mathcal{T}(\lambda(k))u = (0; 2ike^{ikb/h}) \quad \text{si } k < 0, k^2 \neq B.$$

Réciproquement, si pour $k > 0$ (resp. $k < 0, k^2 \neq B$), $u \in \mathcal{S}(\lambda(k))$ vérifie

$$T(\lambda(k))u = (0; 1) \quad (\text{resp. } T(\lambda(k))u = (1; 0)),$$

alors u est, à constante multiplicative près, la restriction à I de $\psi_-(k, \cdot)$.

Enfin, la fonction ψ_- dépend continûment de $k \in \mathbb{R}, \lambda(k) \neq 0$.

6.9. Remarque.

1. En particulier la proposition dit que pour $\lambda > 0$, $\mathcal{T}(\lambda)$ est un isomorphisme.
2. La continuité par rapport au paramètre k peut se voir en formulant l'équation différentielle linéaire sur I sous-jacente de façon intégrale pour la base canonique de $\mathcal{S}(\lambda(k))$, puis en utilisant l'opérateur $\mathcal{T}(\lambda(k))$.
3. On verra dans le chapitre suivant que ce problème homogène avec conditions aux limites est la version affine du problème résonant dans lequel $\lambda(k)$ est pris complexe.
4. Noter que si l'on dispose explicitement d'une base de $\mathcal{S}(z)$, le calcul des fonctions propres généralisées se réduit à la résolution d'un système affine matriciel.

6.3 Calcul des états de diffusion sur un cas particulier

L'introduction de l'opérateur transparent permet de réduire le calcul des états de diffusion à un problème du plan affine. Dans le cas du potentiel constant sur I , on dispose d'une base explicite du plan, ce qui permet un calcul complet. On considère le Hamiltonien $H_|(h)$ défini par

$$D(H_|(h)) = H^2(a; b), \quad H_|(h)u := -h^2 u'' + V_1 u, \quad (6.3.1)$$

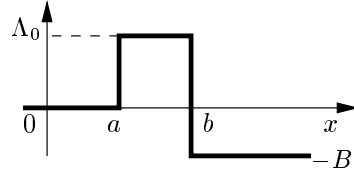


Figure 6.2. Hamiltonien pour le potentiel V_1 .

où $V_1 \in L^\infty$ est donné par (cf. figure 6.2) :

$$V_1(x) = \Lambda_0 \cdot \mathbb{1}_{[a;b]}(x) + \mathcal{B}(x - b).$$

En effet, en tant que perturbation compacte de $H_B(h)$, on déduit, avec les résultats de la section 1.2 pour $H_1(h)$, l'existence d'un principe d'absorption limite et d'un développement en fonctions propres généralisées.

On a alors l'asymptotique suivante pour les fonctions propres généralisées :

■ 6.10. Proposition. *Pour le Hamiltonien $H_1(h)$, les fonctions propres généralisées s'écrivent localement uniformément en $k > 0$, lorsque $h \rightarrow 0$:*

$$\psi_-(k; x) = -\frac{2ike^{ika/h}}{S - ik} e^{-S(x-a)/h} (1 + \mathcal{O}(e^{-2S(b-x)/h})),$$

avec $S := \sqrt{\Lambda_0 - k^2}$ et pour $k < \sqrt{B}$ par

$$\psi_-(-k; x) = -\frac{2ike^{ikb/h}}{S + ik} e^{S(x-b)/h} (1 + \mathcal{O}(e^{-2S(x-a)/h})),$$

où cette fois $S := \sqrt{\Lambda_0 - k^2 + B}$.

On s'intéresse aux énergies $\lambda \in [\Lambda_*; \Lambda^*] \subset]0; \Lambda_0[$, λ étant relié à k par l'équation de dispersion (5.1.3) p.58 $k \mapsto \lambda = \lambda(k)$. Les fonctions ψ_- sont données à la constante multiplicative près μ_k ($\mu_k = 2ike^{ika/h}$ si $k > 0$, et $\mu_k = 2ike^{ikb/h}$ si $k < 0$) par le système

$$-h^2 \psi_-(k, \cdot)'' + (\Lambda_0 - \lambda(k)) \psi_-(k, \cdot) = 0. \quad (6.3.2)$$

$$\mu_k^{-1} \mathbb{T}(\lambda) \psi_-(k, \cdot) = (1; 0) \quad \text{si } k > 0, \quad (6.3.3)$$

$$\mu_k^{-1} \mathbb{T}(\lambda) \psi_-(k, \cdot) = (0; 1) \quad \text{si } k < 0. \quad (6.3.4)$$

Dans $[a; b]$ on décompose ψ_- sur la base ci-dessous :

$$\psi_-(k, x) = \alpha_+ e^{\sqrt{\Lambda_0 - \lambda}x/h} + \alpha_- e^{-\sqrt{\Lambda_0 - \lambda}x/h}, \quad \alpha_{\pm} \in \mathbb{C}.$$

Posant (cf. (5.1.3))

$$\lambda = \lambda(k), \quad S := \sqrt{\Lambda_0 - \lambda}, \quad L_a := \exp(Sa/h), \quad L_b := \exp(Sb/h)$$

les relations (6.3.2)-(6.3.3) se traduisent par un système linéaire sur $(\alpha_+; \alpha_-)$ dont la matrice est

$$\Delta(h) := \begin{pmatrix} (S + i\sqrt{\lambda})L_a & -(S - i\sqrt{\lambda})L_a^{-1} \\ (S - i\sqrt{\lambda + B})L_b & -(S + i\sqrt{\lambda + B})L_b^{-1} \end{pmatrix}, \quad (6.3.5)$$

et de déterminant :

$$\det \Delta(h) = (S - i\sqrt{\lambda})(S - i\sqrt{\lambda + B})L - (S + i\sqrt{\lambda})(S + i\sqrt{\lambda + B})L^{-1},$$

où l'on a posé

$$L := L_b L_a^{-1} = e^{S(b-a)/h}.$$

On remarque ensuite que pour $h > 0$ assez petit on a

$$D(h) := \det \Delta(h) \underset{h \rightarrow 0}{\sim} (S - i\sqrt{\lambda})(S - i\sqrt{\lambda + B})e^{S(b-a)/h}, \quad (6.3.6)$$

et ceci uniformément en $\lambda \in [\Lambda_*; \Lambda^*]$. Ainsi, $\Delta(h)$ est inversible et les coefficients $(\alpha_+; \alpha_-)$ sont alors donnés, compte tenu de la normalisation (6.3.2)-(6.3.3) et *modulo* μ_k , respectivement pour $k > 0$ et $k < 0$, par les première et deuxième colonne de $\Delta^{-1}(h)$. Un calcul direct donne

$$\Delta(h)^{-1} = \frac{1}{D(h)} \begin{pmatrix} -(S + i\sqrt{\lambda + B})L_b^{-1} & (S - i\sqrt{\lambda})L_a^{-1} \\ -(S - i\sqrt{\lambda + B})L_b & (S + i\sqrt{\lambda})L_a \end{pmatrix}.$$

D'où l'on tire pour $k = \sqrt{\lambda} > 0$, en écrivant selon (6.3.6) $D(h) = d(h)e^{S(b-a)/h}$:

$$\begin{aligned} \psi_-(\sqrt{\lambda}; x) &= -\frac{2ike^{ika/h}}{d(h)} \left[(S + i\sqrt{\lambda + B})e^{S(x-2b+a)/h} \right. \\ &\quad \left. + (S - i\sqrt{\lambda + B})e^{-S(x-a)/h} \right], \end{aligned} \quad (6.3.7)$$

et pour $k = -\sqrt{\lambda + B} < 0$:

$$\psi_-(-\sqrt{\lambda + B}; x) = \frac{2ike^{ikb/h}}{d(h)} \left[(S - i\sqrt{\lambda})e^{S(x-b)/h} + (S + i\sqrt{\lambda})e^{-S(x-2a+b)/h} \right]. \quad (6.3.8)$$

Factorisant (6.3.7 par) $e^{-S(x-b)/h}$ et (6.3.7) par $e^{S(x-a)/h}$, on obtient, utilisant l'équivalent (6.3.6) les expressions asymptotiques uniformes en λ, x pour ψ_- , lorsque $h \rightarrow 0$:

$$\psi_-(\sqrt{\lambda}; x) = -\frac{2i\sqrt{\lambda}e^{i\sqrt{\lambda}a/h}}{S - i\sqrt{\lambda}} e^{-S(x-a)/h} (1 + \mathcal{O}(e^{-2S(b-x)/h})), \quad (6.3.9)$$

$$\psi_-(-\sqrt{\lambda+B}; x) = -\frac{2i\sqrt{\lambda+B}e^{i\sqrt{\lambda+B}b/h}}{S - i\sqrt{\lambda+B}} e^{S(x-b)/h} (1 + \mathcal{O}(e^{-2S(x-a)/h})).$$

6.11. Remarque.

1. On constate que l'onde représentée par ψ_- arrive à l'entrée de l'île avec une amplitude d'ordre 1, tandis qu'elle est exponentiellement amortie à la sortie de l'île au taux $e^{-S(b-a)/h}$, c'est-à-dire par le diamètre d'Agmon de l'île à l'énergie λ .

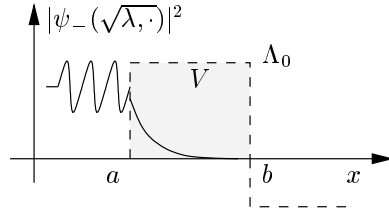


Figure 6.3. L'onde représentée par ψ_- , qui est exponentiellement amortie dans l'île, se concentre au bord.

2. L'équivalent (6.3.6) obtenu uniformément en $\lambda \in [\Lambda_*; \Lambda^*]$ est encore valable pour λ devenu z appartenant à un voisinage complexe ω de $[\Lambda_*; \Lambda^*]$. On verra dans le chapitre suivant (prop. 7.2) que z est une résonance pour $H_1(h)$ si et seulement si $D(h) = 0$. Ainsi on a prouvé que $H_1(h)$ ne possède pas de résonances dans ω .
3. Cette expression asymptotique permet de calculer la densité d'états locale pour cet Hamiltonien (cf. prop. 10.12, p.106). À la limite $h \rightarrow 0$, on s'attend à ce que la densité soit nulle dans l'île puisque la barrière est une région classiquement inaccessible. Néanmoins, il y a accumulation de charges au bord de l'île : c'est l'effet de peau.

Résonances quantiques en dimension 1

Dans cette partie, on introduit très sommairement la notion de résonances et on indique un moyen de les détecter dans notre situation unidimensionnelle. On verra en particulier que cela se ramène à la question de l'inversibilité d'un opérateur *non auto-adjoint* défini sur I avec conditions aux limites dépendant du paramètre spectral. On fait également le lien avec les états de diffusion définis dans le chapitre précédent, et à la fin du chapitre, on complète la preuve du lemme 3.16 p. 41.

7.1 Plusieurs approches

Il y a différentes façons de présenter les résonances. En effet, bien que la notion de résonance soit connue depuis longtemps (années 30 environ), celle-ci est assez difficile à définir. *Grosso modo*, on peut penser les résonances comme les mémoires de valeurs propres plongées d'un Hamiltonien perturbé, cf. p. ex [ReSi4] où cet aspect est abordé sur l'exemple de l'absorption de lumière par un atome d'Hélium.

Une première approche consiste à recourir aux dilatations analytiques, cf. par exemple [HiSi], chap.12 et 16, qui reprend le point de vue fondateur de Combes dans sa thèse et l'approche de Aguilar-Baslev-Combes, [AgCo], [BaCo], ou encore [ReSi4], pp.51 et suivantes. On peut brièvement dire que son principe consiste à conjuguer l'opérateur dont on cherche les résonances par une famille à paramètre analytique de transformations linéaires, ce qui permet de déplacer la coupure spectrale. Ainsi on fait apparaître dans la région spectrale nouvellement accessible les pôles du prolongement méromorphe de la résolvante : ce sont les résonances, cf. figure 7.1. Il est remarquable que ces pôles ne dépendent pas de la déformation. On peut également rattacher à ce type d'approche la méthode dite de boîte noire de Sjöstrand et Zworski.

On peut adopter aussi le point de vue de Helffer et de Sjöstrand, voir [HeSj1]. L'idée cette fois est de conserver le même opérateur, mais de faire opérer sur d'autres espaces. En outre, l'article de A. Martinez et A. Lahmar-Benbernou [LaMa] propose une version quelque peu simplifiée qui n'autorise que des déformations en dehors d'une partie compacte de l'espace des phases. Pour une synthèse des différentes approches, on pourra se reporter à l'article de Helffer-Martinez [HeMa].

Toutes ces méthodes ont été jusqu'à présent appliquées dans un cadre purement semi-classique conduisant à des asymptotiques parfois très précises des résonances exponentiellement proches de l'axe réel (Helffer-Sjöstrand, Martinez-Benbernou). Ces estimations nécessitent toutefois une régularité que l'on ne peut espérer dans le contexte non-linéaire qui nous intéresse, qui plus est avec la présence d'un potentiel quantique. Enfin, le cadre de la physique du solide, où la modélisation unidimensionnelle par des barrières franches est pertinente, incite à adopter une méthode plus explicite : celle-ci consiste à ramener le problème sur la droite réelle à un problème aux limites sur le segment $[a; b]$ dépendant du paramètre spectral. Néanmoins certaines techniques de Helffer-Sjöstrand, [HeSj1], [HeSj2], ou Gérard-Martinez, [GeMa], notamment, telles que l'approche perturbative (cf. chapitre 15), sont reprises ici afin d'obtenir une bonne asymptotique des résonances.

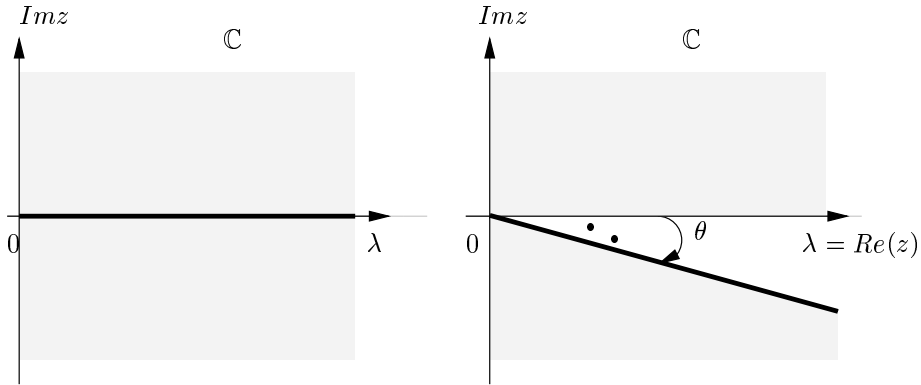


Figure 7.1. Dans la zone en blanc, on peut calculer le prolongement méromorphe de $R(z; h)$: les pôles apparaissant sont les résonances.

7.2 Comment détecter les résonances ?

Une façon de définir les résonances d'un opérateur consiste à les obtenir comme valeurs propres d'une déformation complexe de celui-ci. Il se trouve que ces valeurs propres (qui ne sont pas à proprement parler des valeurs propres pour $H(h)$) sont à une distance d'ordre $e^{-C/h}$ de l'axe réel, et que les singularités des résolvantes associées ont un effet sur l'évaluation de certaines quantités spectrales associées à $H(h)$ (cf. notamment la formule de Breit-Wigner [ReSi4], ou l'article

de [GeMa]).

Les résonances apparaissent lorsque l'on fait opérer $P(h)$, pour $t > 0$, sur l'espace $L_t^2 := L^2(\chi\mathbb{R} + e^{it}(1 - \chi)\mathbb{R})$, où la fonction χ est une fonction plateau valant 1 sur le support de V .

■ **7.1. Définition.** On appelle *résonance de $H(h)$* toute valeur propre de l'opérateur A non borné sur L_t^2 et défini par :

$$D(A) = \{u \in L_t^2 \mid P(h)u \in L_t^2\}, \quad Au = zu.$$

On verra que ces valeurs propres ne dépendent ni du paramètre t , ni de la troncature χ . En pratique, cela revient à chercher les solutions distributions sur \mathbb{R} de l'équation

$$P(h)u = zu, \quad z \in \mathbb{C},$$

et qui s'étendent holomorphiquement sur un voisinage de l'axe réel.

Dans notre cas, on remarque qu'en dehors du support de χ , u est combinaison des modes exponentiels :

$$u(\zeta) = \lambda_- e^{+iz^{1/2}\zeta} + \mu_- e^{-iz^{1/2}\zeta}, \quad \zeta \rightarrow -\infty \quad (7.2.1)$$

$$u(\zeta) = \lambda_+ e^{+i(z+B)^{1/2}\zeta} + \mu_+ e^{-i(z+B)^{1/2}\zeta}, \quad \zeta \rightarrow +\infty, \quad (7.2.2)$$

où l'on a choisi la racine carrée définie dans la partie 6.1 du chapitre précédent, holomorphe au voisinage de \mathbb{R}^* .

De cette forme explicite, il est immédiat de voir que u définie pour ζ réel a encore un sens pour ζ non réel par prolongement holomorphe.

La condition $u \in L_t^2$ permet de sélectionner les modes admissibles. Afin d'expliquer cela, on pose

$$\zeta = e^{it}x, \quad x \in \mathbb{R}, \quad |x| \rightarrow \infty.$$

Puisque l'on cherche les résonances proches de l'axe réel quand $h \rightarrow 0$, on fixe donc $t > 0$ et on suppose que l'on a

$$\left| \frac{\operatorname{Im} z}{\operatorname{Re} z} \right| < 2t, \quad z \in \mathbb{C}, \quad t > 0. \quad (7.2.3)$$

On distingue alors suivant le signe de la partie réelle de z .

■ $-B < \operatorname{Re} z < 0$. Dans ce cas il convient de poser :

$$z := re^{i\alpha}, \quad \alpha = \pi + \theta, \quad |\theta| < 2t, \quad 0 < r < B.$$

(attention à la détermination de l'angle), et on étudie le comportement à l'infini de la fonction $u(\zeta)$. Un calcul direct donne :

$$\operatorname{Re} \left(i\sqrt{z}^+ \zeta \right) = \operatorname{Re} \left(e^{i\pi/2} \sqrt{r} e^{i\alpha/2} e^{it} x \right) = -\sqrt{r} x \cos(t + \theta/2), \quad \operatorname{Re}(\zeta) \rightarrow -\infty,$$

tandis que pour $Re(\zeta) \rightarrow +\infty$, $(z+B)$ est un complexe de partie réelle strictement positive. Posons alors

$$z + B := \rho^2 e^{i\alpha'}, \quad \rho > 0, \quad |\alpha'| < \frac{\pi}{2}.$$

Par suite

$$Re \left(i(z+B)^{1/2} \zeta \right) = Re \left(e^{i\pi/2} \rho e^{i\alpha'/2} e^{it} x \right) = -x\rho \sin(t + \alpha'/2),$$

où l'angle α' est contrôlé par $2t$. Comme on $u \in L_t^2$, cela impose

$$u(\zeta) \underset{Re(\zeta) \rightarrow -\infty}{=} \mu e^{-iz^{1/2}\zeta}.$$

■

■ $Re z > 0$. On pose dans ce cas :

$$z := r e^{i\alpha}, \quad \alpha \in]-2t; 2t[$$

Puisque z et $z+B$ sont de partie réelle positive, on est ramené au premier calcul du cas précédent pour $|Re z| \rightarrow \infty$. On conclut immédiatement

$$u(\zeta) \underset{Re(\zeta) \rightarrow +\infty}{=} \lambda e^{+i(z+B)^{1/2}\zeta},$$

et par symétrie

$$u(\zeta) \underset{Re(\zeta) \rightarrow -\infty}{=} \mu e^{-iz^{1/2}\zeta}.$$

■

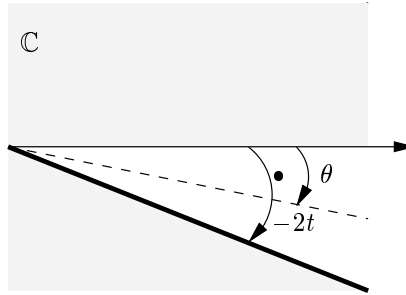


Figure 7.2. Détection des résonances.

Ceci appelle deux remarques importantes

1. L'onde plane u est ainsi caractérisée par le fait de ne pas posséder de composante entrante, au sens où pour $Re \zeta > 0$, u est de la forme $e^{+i(z+B)^{1/2}\zeta}$, et de la forme $e^{-i(z)^{1/2}\zeta}$ pour $Re \zeta < 0$.
2. Une fois révélée pour une valeur t du paramètre, ni la fonction u ni le nombre z ne dépendent du choix de $t' \geq t$.

7.3 Opérateur avec conditions aux limites résonantes

Il se trouve qu'en dimension 1, cette condition aux limites s'écrit très simplement. On énonce :

■ **7.2. Proposition.** Soit $H(z; h)$ l'opérateur non borné fermé défini sur $L^2(a, b)$ par les conditions dites résonantes

$$D(H(z; h)) = \left\{ u \in H^2(a, b) \mid \begin{aligned} & iz^{1/2}u(a) + hu'(a) = 0, \\ & i(z+B)^{1/2}u(b) - hu'(b) = 0 \end{aligned} \right\},$$

$$\text{et } H(z; h)u = P(h)u.$$

Alors z est une résonance de $H(h)$ si et seulement si l'opérateur $H(z; h) - z$ n'est pas injectif.

Preuve. Le sens direct a été établi. Réciproquement, soit u une solution non triviale de l'équation $H(z; h)u = zu$. Étendons u à toute la droite réelle par continuité par les modes exponentiels $u(a)e^{-iz^{1/2}(x-a)/h}$ pour $x \leq a$ et $u(b)e^{i(z+B)^{1/2}(x-b)/h}$ pour $x \geq b$.

Il est immédiat qu'on définit en fait par ellipticité un prolongement H_{loc}^2 de u qui vérifie $P(h)u = zu$, et c'est bien un élément de L_t^2 . ■

■ **7.3. Définition.** Un élément $u \in D(H(z; h))$ vérifiant l'équation $H(z; h)u = zu$ est appelé état résonant associé à la résonance z .

7.4. Remarque.

1. En termes de l'opérateur $\mathbb{T}(z)$ introduit dans la définition 6.4, on a donc :

$$D(H(z; h)) = \text{Ker } \mathbb{T}(z).$$

2. Par définition un état résonant est un élément non trivial de $D(H(z; h)) \cap \mathcal{S}(z)$. Comme $\mathcal{T}(z)$ est la restriction de $\mathbb{T}(z)$ à $\mathcal{S}(z)$, la proposition 7.2 dit que z est une résonance si et seulement si $\mathcal{T}(z)$ n'est pas injectif, ce qui équivaut à sa non bijectivité, tandis que la proposition 6.8 nous dit que pour $\lambda > 0$, $\mathcal{T}(\lambda)$ est bijectif.
3. Un état résonant est donc un élément du noyau de l'application $\mathcal{T}(z)$. Comme celle-ci n'est jamais identiquement nulle (regarder son action sur la base canonique de $\mathcal{S}(z)$ pour données de Cauchy en a), son noyau est toujours contenu dans une droite vectorielle de $\mathcal{S}(z)$: deux états résonants associés à la même résonance sont donc liés. Autrement dit, la multiplicité géométrique d'une résonance est toujours égale à 1. On verra que ce n'est pas le cas de la multiplicité algébrique (cf. corollaire 15.4.3 p. 191).

4. En termes de projecteurs spectraux, on peut également définir la notion d'état résonant généralisé comme un élément du projecteur spectral associé à l'opérateur A introduit précédemment. Le point 6 ci-après garantit en effet qu'à $h > 0$ fixé, les résonances forment un ensemble de points isolés.
5. Cela pose le problème de la diagonalisabilité de l'opérateur A , alors que celle-ci est acquise dans la situation non-déformée, qui est auto-adjointe. D'ailleurs des cas d'existence de blocs de Jordan en été mis en évidence dans un cadre semi-classique, voir p.ex [Am-Se] ou [GrMaSa] : les quantités spectrales pertinentes, car robustes sous perturbation, sont les sous-espaces caractéristiques (qui sont bien les sous-espaces propres dans la situation non-déformée), obtenus comme images des projecteurs spectraux.
6. On peut voir que la non-inversibilité de $\mathcal{T}(z)$ équivaut à l'annulation d'une fonction holomorphe $z \mapsto F(z)$: par exemple, on peut considérer la base de $\mathcal{S}(z)$ de solutions $\{u_0(z, \cdot), u_1(z, \cdot)\}$ vérifiant les conditions de Cauchy suivantes en $x = a$

$$\frac{d^j}{dx^j} u_i(z, \cdot)|_{x=a} = \delta_{i,j}, \quad i, j \in \{0, 1\},$$

et la matrice $M(z)$ de $\mathcal{T}(z)$ s'écrit alors sur cette base

$$M(z) = \begin{pmatrix} iz^{1/2} & h \\ hu'_0(z, b) - (z + B)^{1/2}u_0(z, b) & hu'_1(z, b) - (z + B)^{1/2}u_1(z, b) \end{pmatrix}.$$

Il reste à voir que cette application matricielle est holomorphe. Pour cela, en posant pour $z \in \mathbb{C}$, et $x \in [a; b]$

$$U(z, x) := \begin{pmatrix} u_0(z, x) & u_1(z, x) \\ u'_0(z, x) & u'_1(z, x) \end{pmatrix}, \quad A(z, x) := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ V^1(x) - z & 0 \end{pmatrix},$$

on sait que $U(z, \cdot)$ est déterminé par l'équation au point fixe :

$$U(z, x) = I_2 + \int_a^x A(z, s)U(z, s) ds.$$

La méthode des approximations successives et la dépendance holomorphe de l'intégrande (dominée localement uniformément par rapport à z par une fonction L_x^1) donnent que la fonction matricielle :

$$\mathbb{C} \longrightarrow \mathcal{M}_2(\mathbb{C}), \quad z \mapsto U(z, b)$$

est entière, et avec le point 3 ci-dessus, on conclut que z est une résonance si et seulement si z annule la fonction holomorphe $z \mapsto \det M(z)$.

7. En pratique, l'équation $\det M(z) = 0$ est rarement exploitable, dans la mesure où elle exige la détermination explicite d'une base de solutions dépendant holomorphiquement de z . Toutefois, dans le cas de potentiels simples,

comme par exemple le cas du potentiel constant sur I (p.65 et le point 2. de la remarque à la fin du calcul), ou celui de la charge ponctuelle dans un champ de potentiel constant (section 7.5), c'est précisément cette approche qui est suivie.

8. Enfin, pour faire le lien avec les calculs des fonctions $v_{\pm}(z, \cdot)$ du chapitre précédent, l'ensemble des z pour lesquels $F(z)$ s'annule correspond à l'ensemble exceptionnel des pôles des fonctions méromorphes τ_{\pm} et ρ_{\pm} à cause de la normalisation adoptée, et du fait que ces coefficients sont reliés par un système linéaire à coefficients méromorphes. Cela revient à adopter le point de vue des résonances comme pôles de la matrice de diffusion.

7.4 Lien avec l'opérateur $H(h)$

Pour z non réel, la question de la résolution de l'équation $(P(h) - z)u = f$, où f est supportée dans I pour l'étude de la résolvante sur L^2 non déformé, ou $f \equiv 0$ pour la recherche de vecteurs propres sur l'espace L^2 déformé, conduit à la sélection de certains modes exponentiels admissibles. Il doit donc y avoir un lien entre ces deux problèmes. C'est effectivement le cas puisque :

■ **7.5. Proposition.** *Pour $z \in \mathbb{C}$, $\text{Im } z > 0$, on a la relation suivante*

$$\mathbb{1}_I(H(h) - z)^{-1}\mathbb{1}_I = (H(z; h) - z)^{-1}.$$

Autrement dit, pour f dans $L^2(I)$ (et prolongée par zéro en dehors de I), la restriction à I de la solution à l'équation $(H(h) - z)u = f$ sur $L^2(I)$ est $(H(z; h) - z)^{-1}f$.

7.6. Remarque. Ainsi pour z non réel, et sur l'île I , les opérateurs $H(h)$ et $H(z; h)$ sont interchangeable. C'est pourquoi on emploie également pour les conditions résonantes le terme de conditions transparentes. Cela permet de traiter simultanément la résolvante de $H(h)$ et les résonances.

Preuve. Considérons l'équation

$$(H - z)u = f, \quad z \in \mathbb{C}, \quad f \in L^2(I). \quad (7.4.1)$$

On voit qu'en dehors de I , puisque les parties imaginaires de \sqrt{z} et de $\sqrt{z + B}$ sont positives et que f est supportée dans I qu'il faut éliminer les modes exponentiels entrants dans l'expression de la solution u . Par régularité elliptique, on sait que u est H^2 sur tout compact. Il en découle que cette fonction est dans le domaine de $H(z; h)$ et qu'elle résout le problème $(P(h) - z)u = f$. ■

Pour $\text{Im } z < 0$, la sélection des modes exponentiels admissibles en dehors du support de V pour la solution de (7.4.1) conduit à considérer l'opérateur avec conditions aux limites spécifiant l'absence d'onde sortante, ou anti-résonantes :

■ **7.7. Définition.** Soit $H'(z; h)$ l'opérateur non borné fermé défini sur $L^2(a, b)$ par les conditions dites anti-résonantes

$$\begin{aligned} D(H'(z; h)) &= \{u \in H^2(a, b) \mid hu'(a) - i\sqrt{z}u(a) = 0, \\ &\quad hu'(b) + i\sqrt{z+B}u(b) = 0\}, \end{aligned}$$

$$\text{et } H'(z; h)u = P(h)u.$$

De même que pour la proposition précédente, on montre

■ **7.8. Proposition.** Pour $\text{Im } z < 0$, on a :

$$\mathbb{1}_I(H(h) - z)^{-1}\mathbb{1}_I = (H'(z; h) - z)^{-1}.$$

Il est facile de relier $H'(z; h)$ à $H(z; h)$:

■ **7.9. Proposition.** Pour $\text{Im } z < 0$, et $\text{Re } z > 0$, on a

$$H'(z; h) = H(\bar{z}; h)^*.$$

Preuve. Il suffit de remarquer que dans le premier quadrant du plan complexe, (cf. figure 3.2 p.35), on a $\sqrt{\bar{z}} = \overline{\sqrt{z}}$. Ensuite pour calculer l'adjoint de $H(z; h)$, il suffit de remarquer que la forme linéaire $H^1(I) \ni u \mapsto u(a)$, n'admet pas de prolongement sur L^2 . ■

■ **7.10. Corollaire.** Pour tout réel $\lambda > 0$, les opérateurs $(H(\lambda; h) - \lambda)^{-1}$ et $((H(\lambda; h) - \lambda)^{-1})^*$ sont de type Hilbert-Schmidt, et sont des fonctions continues de λ .

Preuve. En effet, il suffit d'écrire pour z non réel, $\text{Im } z > 0$ et $s > 1/2$:

$$\begin{aligned} (H(z; h) - z)^{-1} &= \mathbb{1}_I(H(h) - z)^{-1}\mathbb{1}_I \\ &= \mathbb{1}_I \langle x \rangle^s \cdot \langle x \rangle^{-s} (H(h) - z)^{-1} \langle x \rangle^{-s} \cdot \langle x \rangle^s \mathbb{1}_I, \end{aligned}$$

et d'appliquer le principe d'absorption limite (corollaire 3.17), l'opérateur $\langle x \rangle^s \mathbb{1}_I$ étant borné, et le membre de gauche étant une fonction holomorphe sur un voisinage complexe de $] -B; \infty[$ (cf. corollaire 15.18 p.191). Quant à l'adjoint, utiliser que l'idéal Hilbert-Schmidt est stable par adjonction. ■

7.5 Calcul explicite sur un exemple

Dans cette partie, on donne un calcul explicite de résonances sur un cas particulier, ce qui permet de mettre en évidence les propriétés connues résumées après la proposition 7.15 p.82.

■ **7.11. Notation.** Soit $c \in]a; b[$ et $E_0 > 0$. On pose

$$V(x) := E_0 \cdot \mathbb{1}_{[a; b]} - 2qh\delta_{x=c}, \quad (7.5.1)$$

E_0, q , étant des constantes positives données et $\delta_{x=c}$ désignant la mesure de Dirac. Il faut bien entendu comprendre la définition de l'opérateur $-h^2 d^2/dx^2 + V$ ci-dessus au sens des formes(cf. [ReSi2] sur cette notion), c'est-à-dire ici au sens de $H^1(a; b)$:

$$\forall u \in H^1(a, b), \quad \int_a^b h\psi' h\bar{u}' + \int_a^b (V - E_0)\psi\bar{u} - h[h\psi'\bar{u}]_a^b = 2qh\psi(c)\bar{u}(c), \quad (7.5.2)$$

équation obtenue en multipliant (7.11) par \bar{u} et en effectuant une intégration par parties.

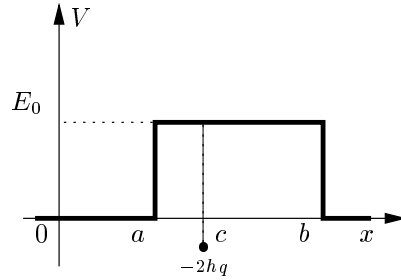


Figure 7.3. Potentiel avec puits ponctuel.

7.5.1 Remarque préliminaire sur le problème sur la droite réelle

On peut chercher les valeurs propres de la réalisation auto-adjointe sur $L^2(\mathbb{R})$ de l'opérateur avec le potentiel ci-dessus étendu à \mathbb{R} , c'est-à-dire :

$$-h^2\psi'' + [E_0 - 2qh\delta_{x=c}]\psi = \lambda\psi, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (7.5.3)$$

On obtient directement

$$\psi = a_+ e^{\sqrt{E_0 - \lambda}(x-c)/h} + a_- e^{-\sqrt{E_0 - \lambda}(x-c)/h}, \quad x < c$$

$$\psi = b_+ e^{\sqrt{E_0 - \lambda}(x-c)/h} + b_- e^{-\sqrt{E_0 - \lambda}(x-c)/h}, \quad x > c.$$

On a alors, puisque la solution⁵ ψ doit être dans L^2 ,

$$a_- = b_+ = 0.$$

Par ailleurs, la condition de saut en $x = c$ de la dérivée se traduit par les équations

$$\begin{aligned} a_+ &= b_- \\ -b_- \sqrt{E_0 - \lambda}/h - a_+ \sqrt{E_0 - \lambda}/h &= -2q/hb_-, \end{aligned}$$

d'où la condition spectrale :

$$-2\sqrt{E_0 - \lambda} = q, \quad i.e. \quad \lambda = E_0 - q^2.$$

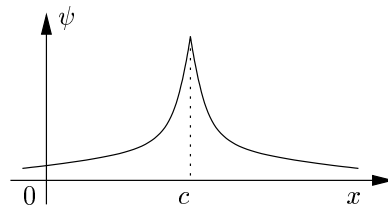


Figure 7.4. *Décroissance exponentielle des fonctions propres.*

Revenons au problème initial : si l'on tronque le potentiel au segment $[a; b]$, l'ellipticité du problème suggère que le spectre ponctuel fluctue peu (cf. chapitre 12, théorème 12.9). Si l'on se souvient par ailleurs que les résonances sont les mémoires de valeurs propres plongées, il est naturel de formuler l'hypothèse suivante :

■ **7.12. Hypothèse.** *On suppose que $\lambda_0 := E_0 - q^2 > 0$,*

et de chercher une résonance près de l'énergie λ_0 .

7.5.2 Calculs

Compte tenu de ce qui a été décrit dans la section 7.3, on peut calculer explicitement sur ce cas particulier une base de solutions de l'espace $\mathcal{S}(\lambda)$, pour λ devenu z complexe, et écrire la matrice de l'application $\mathcal{T}(z)$ introduite, le paramètre B étant pris ici égal à zéro.

Explicitons une base de $\mathcal{S}(z)$: si $\psi \in \mathcal{S}(z)$ alors ψ vérifie

$$-h^2 \psi'' + (E_0 - z)\psi = 0, \quad x \in]a, b[, \quad x \neq c, \quad (7.5.4)$$

⁵On peut noter que la fonction associée décroît exponentiellement par rapport au paramètre $1/h$ dans les régions elliptiques $\{V - \lambda > 0\}$, cf. figure 7.5.

avec les conditions de raccord en $x = c$ dues à la présence du potentiel ponctuel (reprendre la formulation variationnelle (7.5.2) de l'équation différentielle, et décomposer l'intégrale sur $]a; c[$ et $]c; b[$), on a

$$\psi(c^+) = \psi(c^-) =: \psi(c), \quad (7.5.5)$$

$$h\psi'(c^+) - h\psi'(c^-) = -2q\psi(c) \quad (7.5.6)$$

que l'on réécrit plus symétriquement

$$h\psi'(c^+) - h\psi'(c^-) = -q[\psi(c^+) + \psi(c^-)]. \quad (7.5.7)$$

■ **7.13. Notation.** On pose pour $z \in \mathbb{C}$,

$$S = S(z) := \sqrt{E_0 - z}, \quad L = L(z) := e^{S(z)(b-a)/h}, \quad \theta := \frac{c-a}{b-a} \in]0; 1[,$$

et $\zeta_{\pm}(z) := S(z) \pm i\sqrt{z}$, la racine carrée ici désignant la racine usuelle holomorphe ramifiée sur \mathbb{R}_- .

Noter que pour $z = \lambda_0$, $S = q$, si bien que pour z voisin de λ_0 , $\zeta_{\pm}(z) \neq 0$, $S + q \neq 0$. Passons aux calculs :

1. Pour $x \in]a; c[$ ψ est de la forme

$$\psi(x) = A_- e^{-\frac{S}{h}(c-x)} + A_+ e^{\frac{S}{h}(c-x)}, \quad A_{\pm} \in \mathbb{C}, \quad (7.5.8)$$

et

$$h\psi'(x) = SA_- e^{-\frac{S}{h}(c-x)} - SA_+ e^{\frac{S}{h}(c-x)}, \quad (7.5.9)$$

2. De même, pour $x \in]c; b[$, ψ s'écrit

$$\psi(x) = B_+ e^{\frac{S}{h}(x-c)} + B_- e^{-\frac{S}{h}(x-c)}, \quad B_{\pm} \in \mathbb{C}, \quad (7.5.10)$$

et

$$h\psi'(x) = SB_+ e^{\frac{S}{h}(x-c)} - SB_- e^{-\frac{S}{h}(x-c)}. \quad (7.5.11)$$

3. Les conditions de raccord (7.5.5) et (7.5.7) s'écrivent à l'aide de (7.5.8)-(7.5.11)

$$A_+ + A_- - B_+ - B_- = 0 \quad (7.5.12)$$

$$(S + q)A_+ - (S - q)A_- + (S + q)B_+ - (S - q)B_- = 0. \quad (7.5.13)$$

Ce système est visiblement de rang 2, on prend comme inconnues principales par exemple A_+ et B_+ , A_- , B_- devenant des paramètres. On trouve alors que A_+ et B_+ sont donnés par

$$A_+ = 1/2(\omega + 1)B_- + 1/2(\omega - 1)A_-, \quad (7.5.14)$$

$$B_+ = 1/2(\omega + 1)A_- + 1/2(\omega - 1)B_-, \quad (7.5.15)$$

ω étant défini par

$$\omega := \frac{S - q}{S + q}.$$

On choisit alors la base de solutions ψ_1 et ψ_2 données respectivement par $(A_-, B_-) = (1, 0)$ et $(A_-, B_-) = (0, 1)$ ce qui donne pour ψ_1 :

$$A_- = 1, \quad B_- = 0, \quad A_+ = -\frac{q}{S + q} =: -\beta, \quad B_+ = \frac{S}{S + q} =: \alpha, \quad (7.5.16)$$

(noter que $\alpha + \beta = 1$), et pour ψ_2 :

$$A_- = 0, \quad B_- = 1, \quad A_+ = \alpha, \quad B_+ = -\beta. \quad (7.5.17)$$

4. On calcule les matrices des formes linéaires $\psi \mapsto h\psi'(a) + i\sqrt{z}\psi(a)$ et $\psi \mapsto h\psi'(b) - i\sqrt{z}\psi(b)$ sur la base $\{\psi_1, \psi_2\}$, dont les éléments sont connus explicitement. Cela donne la matrice de l'application $\mathcal{T}(z)$ sur cette base, à savoir :

$$\begin{pmatrix} L^{-\theta}\zeta_+ + \beta L^\theta\zeta_- & -\alpha L^\theta\zeta_- \\ \alpha L^{1-\theta}\zeta_- & -L^{\theta-1}\zeta_+ - \beta L^{1-\theta}\zeta_- \end{pmatrix}.$$

5. La nullité du déterminant de cette matrice traduit le fait que $\mathcal{T}(z)$ n'est pas injectif, c'est-à-dire que z est une résonance (point 2. de la remarque 7.1. p.73). Un calcul direct donne, en utilisant que $\zeta_+\zeta_- = E_0$, puis en divisant par L ,

$$\zeta_+^2 L^{-2} + \beta q E_0 (L^{-2\theta} + L^{-2(1-\theta)}) + (\beta^2 - \alpha^2) \zeta_-^2 = 0 \quad (7.5.18)$$

Multipliant l'équation par $S + q$, et revenant aux définitions de α et de β (7.5.16), on obtient enfin

$$q - S(z) + \frac{q^2 E_0}{\zeta_-^2} (L^{-2\theta} + L^{-2(1-\theta)}) + \left(\frac{\zeta_+}{\zeta_-} \right)^2 L^{-2} = 0 \quad (7.5.19)$$

7.5.3 Analyse asymptotique de l'équation (7.5.19)

Comme suggéré dans l'analyse du problème sur la droite réelle entière, plaçons-nous alors dans l'ouvert

$$U(h) := \{z \in \mathbb{C}, \quad |z - \lambda_0| < h.\}, \quad \lambda_0 = \sqrt{E_0 - q^2}.$$

Posant

$$F(z) := S(z) - q, \quad G(z) := \frac{q^2 E_0}{\zeta_-^2} (L^{-2\theta} + L^{-2(1-\theta)} + \left(\frac{\zeta_+}{\zeta_-}\right)^2 L^{-2}), \quad (7.5.20)$$

l'équation (7.5.19) s'écrit :

$$F(z) - G(z) = 0, \quad (7.5.21)$$

et on applique ensuite le théorème de Rouché sur $U(h)$: on voit immédiatement que $F(\lambda_0) = 0$ et que λ_0 est la seule racine de F dans $U(h)$. Par définition de S , sur $\partial U(h)$ on a pour $h > 0$ assez petit uniformément en z :

$$S(z) = S(\lambda_0) + \mathcal{O}(h) = q + \mathcal{O}(h),$$

et par suite on obtient aussi

$$L = e^{S(z)(b-a)/h} = e^{\mathcal{O}(1)} e^{S(\lambda_0)(b-a)/h}, \quad h \rightarrow 0. \quad (7.5.22)$$

Comme

$$\zeta_{\pm}(z) = \zeta_{\pm}(\lambda_0) + \mathcal{O}(h) = q \pm i\sqrt{\lambda_0} + \mathcal{O}(h) \quad (7.5.23)$$

on déduit que

$$G(z) = \mathcal{O}\left(e^{-\min(2S(\lambda_0)/h(c-a); 2S(\lambda_0)/h(b-c))}\right), \quad \forall z \in \partial U(h) \quad (7.5.24)$$

tandis que pour h assez petit, par analyticité :

$$F(z) = F(z) - F(\lambda_0) = F'(\lambda_0)(z - \lambda_0) + \mathcal{O}(h^2), \quad h \rightarrow 0. \quad (7.5.25)$$

Puisque $F'(\lambda_0) = 1/2q \neq 0$, on a

$$|F(z)| \gg |G(z)|, \quad \forall z \in \partial U(h), \quad h \rightarrow 0. \quad (7.5.26)$$

et on déduit que :

$$\textit{Il y a exactement une résonance dans } U(h).$$

En outre, une analyse directe de (7.5.19), réécrite sous la forme

$$S - q = G(z)$$

donne à l'aide de (7.5.24) et du principe du maximum :

$$S = q + \mathcal{O}\left(e^{-\min(2S_0(c-a)/h; 2S_0(b-c)/h)}\right), \quad \forall z \in U(h).$$

Comme $z = E_0 - S^2$, on obtient finalement

■ **7.14. Proposition.** Soit z_r l'unique résonance autour de k_0^2 . Alors

$$z_r = E_0 - q^2 + \mathcal{O}\left(e^{-\min(2\sqrt{E_0-\lambda_0}(c-a)/h; 2\sqrt{E_0-\lambda_0}(b-c)/h)}\right)$$

En particulier, la résonance est de partie imaginaire exponentiellement petite.⁶

■

Poursuivons le développement asymptotique. On écrit simplement que

$$S(z) = q + G(z)$$

puis en élevant cette égalité au carré :

$$z = E_0 - q^2 - 2qG(z) + G^2(z),$$

que l'on réécrit, utilisant (7.5.24) :

$$e^{-\min(2\sqrt{E_0-\lambda_0}(c-a)/h; 2\sqrt{E_0-\lambda_0}(b-c)/h)}(z - (E_0 - q^2)) = -2\frac{q^3 E_0}{\zeta_-^2(z)}(1 + o(1)).$$

Prenant la limite quand h tend vers zéro, on obtient que le membre de droite de l'équation ci-dessus tend, puisque $z \rightarrow \lambda_0$, vers

$$\ell := -2q \left(\frac{q}{E_0}\right)^3 (q + q^2 - E_0 + 2i\sqrt{E_0 - q^2}).$$

Ainsi

■ **7.15. Proposition.** On a

$$z_r \underset{h \rightarrow 0}{\sim} E_0 - q^2 + \frac{2q^4 \alpha}{E_0^3} e^{-\min(2\sqrt{E_0-\lambda_0}(c-a)/h; 2\sqrt{E_0-\lambda_0}(b-c)/h)},$$

où

$$\alpha = (E_0 - q - q^2) - 2i\sqrt{E_0 - q^2}. \quad (7.5.27)$$

En particulier, la partie imaginaire de z est négative. ■

Cet exemple a mis en évidence les propriétés résumées ici :

1. Décroissance exponentielle des fonctions propres du problème de Dirichlet. Ce fait sera précisé dans le chapitre 11.

⁶On peut préciser : la quantité $\min(\sqrt{E_0 - \lambda_0}(c - a); \sqrt{E_0 - \lambda_0}(b - c))$ s'interprète comme la distance du puits au bord de l'île pour la métrique d'Agmon, cf. section 8.2 du chapitre 8, et aussi le corollaire 15.18 p.191.

2. Les résonances sont de partie imaginaire exponentiellement petite et négative. Ces résultats sont établis dans les propositions 15.18 p. 191 et 15.22 p.191.

7.16. Remarque. Si au lieu de considérer l'opérateur \mathcal{T} , on s'intéresse aux formes linéaires $\psi \mapsto \psi(a)$ et $\psi \mapsto \psi(b)$, on obtient la matrice

$$\begin{pmatrix} (S+q)e^{-\theta L/h} - qe^{\theta L/h} & Se^{(1-\theta)L/h} \\ Se^{\theta L/h} & (S+q)e^{-(1-\theta)L/h} - qe^{-(1-\theta)L/h} \end{pmatrix},$$

et la nullité de son déterminant se traduit par l'équation

$$S - q + q(e^{-2\theta L/h} + e^{2(1-\theta)L/h}) - (S+q)e^{-2L/h} = 0,$$

équation dont les racines sont les valeurs propres du problème de Dirichlet. Par rapport au problème sur la droite réelle, on a donc une fluctuation exponentiellement petite des valeurs propres du même ordre que le terme résiduel de la proposition précédente.⁷

7.6 Fin de la preuve de la proposition 3.15

On termine ce chapitre par la preuve d'une version faible du dernier point précédent, et qui permet de compléter la preuve de la proposition 3.15 du chapitre 6.

■ **7.17. Proposition.** Soit $\lambda \in \mathbb{R}^*$, $\lambda > -B$ et $w \in L^2(a; b)$ tel que

$$w \in D(H(\lambda; h)) \quad \text{et} \quad (P(h) - \lambda)w = 0 \quad \text{sur }]a; b[.$$

Alors $w \equiv 0$.

Preuve. Par hypothèse on a

$$\operatorname{Im} \left(\langle (H(\lambda; h) - \lambda)w, w \rangle_{L^2} \right) = 0,$$

mais par ailleurs, cette quantité vaut après intégration par parties (licite car $w \in H^2$), et en utilisant les conditions aux limites⁸

$$\operatorname{Im} \left[\frac{h}{i} \left((\lambda + B)^{1/2} |w(b)|^2 + \lambda^{1/2} |w(a)|^2 \right) - \lambda + \|hw'\|_{L^2}^2 \right],$$

et on obtient la relation suivante :

$$0 = -h \left[\operatorname{Re}(\lambda + B)^{1/2} |w(b)|^2 + \operatorname{Re} \lambda^{1/2} |w(a)|^2 \right].$$

⁷Cette erreur est de l'ordre de $e^{-2S_0/h}$, S_0 s'interprétant comme la distance d'Agmon du puits à l'ensemble des points où le potentiel a été modifié.

⁸Le calcul détaillé est fait dans (14.1.2) p.160.

Comme λ est réel et que $\lambda > -B$, le terme entre crochets est somme de deux termes positifs ou nuls. En particulier, puisque $\lambda + B > 0$, $|w(b)|^2 = 0$, et à cause des conditions mixtes homogènes définissant le domaine de $H(\lambda; h)$, $w'(b) = 0$. Ainsi, w est solution d'un problème de Cauchy standard avec données initiales en b nulles. Cela démontre la proposition. ■

Partie III

Techniques récurrentes

Méthodes d'énergie (Agmon)

Dans l'image de la mécanique classique, si un système conservatif possède une énergie mécanique E donnée, on sait que les régions de l'espace $V > E$, dites classiquement interdites ne lui sont pas accessibles. En mécanique quantique cependant, le support de la fonction d'onde u solution du système $Hu = Eu$ peut rencontrer les régions classiquement interdites : c'est ce que l'on appelle couramment l'effet tunnel : au niveau quantique, une particule peut passer dans les régions classiquement inaccessibles. Néanmoins, à la limite, on s'attend à ce que l'on ait :

$$\int_{V>E} |u|^2 = o(1), \quad h \rightarrow 0.$$

La méthode d'Agmon (cf. [Ag1], ou [He] [DiSj]) permet notamment de quantifier ce résultat. En fait, de façon plus générale, cette méthode fournit des estimations à poids pour des problèmes elliptiques du type $Hu = f$ avec conditions aux limites. On développe ici cet aspect, qui sera utile tout au long du travail. On donnera ensuite une série de corollaires.

8.1 Le point de départ

Le point de départ est l'identité suivante :

■ **8.1. Lemme.** *Soit $\Omega :=]\alpha; \beta[\subset I = [a; b]$, V une fonction dans $L^\infty(\Omega)$, z un nombre complexe et φ une fonction réelle lipschitzienne sur $[\alpha, \beta]$, et $P := -h^2 d^2/dx^2 + V$. Alors pour u_1, u_2 dans $H^2(\Omega)$ on a, en posant $v_j := e^{\varphi/h} u_j$:*

$$\begin{aligned}
\int_{\alpha}^{\beta} e^{2\varphi/h} (P - z) u_1 \bar{u}_2 dx &= \int_{\alpha}^{\beta} h v_1' h \bar{v}_2' dx + \int_{\alpha}^{\beta} (V - z - \varphi'^2) v_1 \bar{v}_2 dx \\
&+ \int_{\alpha}^{\beta} h \varphi' (v_1' \bar{v}_2 - v_1 \bar{v}_2') dx \\
&+ h^2 \left(e^{2\varphi(\alpha)/h} u_1' \bar{u}_2(\alpha) - e^{2\varphi(\beta)/h} u_1' \bar{u}_2(\beta) \right).
\end{aligned}$$

Rappelons encore que par les injections de Sobolev, les valeurs au bord de u, u' pour $u \in H^2(\Omega)$ sont bien définies.

Preuve. Il suffit de partir de la relation de conjugaison suivante

$$e^{\varphi/h} h \frac{d}{dx} e^{-\varphi/h} = h \frac{d}{dx} - \varphi'$$

et d'écrire ensuite

$$\begin{aligned}
\int_{\alpha}^{\beta} e^{2\varphi/h} (P - z) u_1 \bar{u}_2 dx &= \int_{\alpha}^{\beta} \left[e^{\varphi/h} (P - z) e^{-\varphi/h} \right] v_1 \bar{v}_2 dx \\
&= - \int_{\alpha}^{\beta} \bar{v}_2 (h d/dx - \varphi')^2 v_1 + \int_{\alpha}^{\beta} (V - z) v_1 \bar{v}_2 dx \\
&= - \int_{\alpha}^{\beta} \bar{v}_2 \left(h \frac{d}{dx} \right)^2 v_1 + \int_{\alpha}^{\beta} (V - z - \varphi'^2) v_1 \bar{v}_2 dx \\
&+ \int_{\alpha}^{\beta} h \varphi' v_1' \bar{v}_2 dx + \int_{\alpha}^{\beta} \bar{v}_2 h \frac{d}{dx} (\varphi' v_1) dx.
\end{aligned}$$

On effectue alors une intégration par parties sur les premier et dernier termes du membre de droite de la dernière égalité. On obtient :

$$\begin{aligned}
\int_{\alpha}^{\beta} e^{2\varphi/h} (T - z) u_1 \bar{u}_2 dx &= \int_{\alpha}^{\beta} h v_1' h \bar{v}_2' dx - h^2 [\bar{v}_2 v_1']_{\alpha}^{\beta} \\
&+ \int_{\alpha}^{\beta} (V - z - \varphi'^2) v_1 \bar{v}_2 dx + \int_{\alpha}^{\beta} h \varphi' v_1' \bar{v}_2 dx \\
&- \int_{\alpha}^{\beta} h \varphi' v_1 \bar{v}_2' dx + h [\varphi' v_1 \bar{v}_2]_{\alpha}^{\beta},
\end{aligned}$$

et utilisant que

$$h v_1' = e^{\varphi/h} (\varphi' u_1 + u_1'),$$

on obtient l'identité annoncée après regroupement des termes. ■

8.2. Remarque. Cette formulation variationnelle de l'équation $(P - z)u = f$ avec conditions aux bords est utile pour établir l'existence de la résolvante, ainsi que pour obtenir des estimations à poids exponentiel. Par ailleurs, si le poids φ satisfait une équation eiconale adéquate, on peut obtenir des estimations de la norme H^1 de $e^{\varphi/h}u$. La présence du paramètre h incite à introduire une norme adaptée pour toutes ces estimations.

■ **8.3. Définition.** Pour $u \in H^1(I)$ et $0 < h < 1$, on pose :

$$|u|_{1,h}^2 := |u|_{L^2}^2 + |hu'|_{L^2}^2, \quad |u|_{2,h}^2 := |u|_{L^2}^2 + |hu'|_{L^2}^2 + |h^2u''|_{L^2}^2.$$

On définit ainsi des normes équivalentes sur H^1 et H^2 aux normes standard.

8.4. Remarque. Signalons que l'on a les inégalités :

$$h^j |\cdot|_{H^j} \leq |\cdot|_{j,h} \leq |\cdot|_{H^j}, \quad \forall j \in \mathbb{N}. \quad (8.1.1)$$

8.2 Métrique d'Agmon

■ **8.5. Définition.** Soit Ω un ouvert de \mathbb{R} et V une fonction L^∞ sur Ω , et une énergie $\lambda \in \mathbb{R}$. On appelle métrique d'Agmon pour le potentiel V et l'énergie λ la métrique (dégénérée)

$$ds^2 := (V - \lambda)_+ dx^2$$

et on note d la distance associée :

$$\forall (x, y) \in \Omega^2, \quad x \leq y \quad d(x, y; V, \lambda) := \int_x^y \sqrt{(V(\sigma) - \lambda)_+} d\sigma$$

(échanger les bornes si $x > y$). On omettra éventuellement dans la notation V et λ s'il n'y a pas d'ambiguïté.

Ainsi définie, pour x fixé, $d(x, \cdot)$ est une fonction de y qui est $W^{1,\infty}$ et qui satisfait l'équation eiconale

$$\varphi'^2(y) = (V(y) - \lambda)_+. \quad (8.2.1)$$

8.6. Remarque.

1. Si F désigne une partie de Ω , la fonction distance à la partie F jouit des mêmes propriétés de régularité et satisfait la même équation eiconale que $d(\cdot, \{x\})$.

2. Comme toute distance (même dégénérée), la distance d'Agmon de x à F est une fonction lipschitzienne, remarque qui sera utile par la suite (cf. preuve de *i*) du théorème 11.4).
3. Il y a une confusion dans la terminologie : usuellement (voir p. ex [Ag2] ou [HeSj1]), on désigne par puits, l'énergie λ étant donnée, les ensembles $O_\lambda := \{V \leq \lambda\}$. Ainsi, la métrique d'Agmon est dégénérée dans les puits. En particulier chaque composante connexe⁹ de O_λ est de diamètre d'Agmon nul.
4. Dans ce texte, on a fait le choix d'appeler puits l'ensemble U^h (cf. chapitre 1). Cependant, il est bon de remarquer que pour λ dans $[\Lambda_*, \Lambda^*]$, on a, pour les puits de potentiel relatifs à V^h , au sens usuel, l'inclusion $O_\lambda \subset U^h$ (cf. figure 8.1), qui est une conséquence de $\tilde{V}^h > \Lambda^*$. Cependant, pour cette distance, toute composante connexe¹⁰ de U^h , est de diamètre d'Agmon strictement positif. Néanmoins, puisque le diamètre euclidien de chaque composante de U^h est $2h$, avec la remarque 1, on voit qu'on ne commet dans la définition de d qu'une erreur d'ordre h en remplaçant O_λ par U^h .

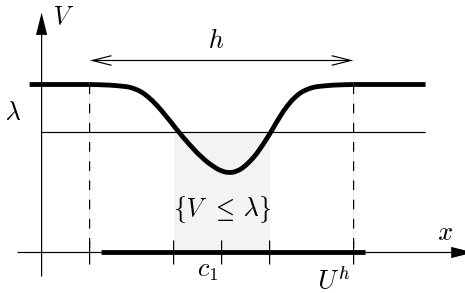


Figure 8.1. Les régions classiquement autorisées $\{V < \lambda\}$ sont contenues dans U^h .

Dans la suite, on sera amené à faire des estimations en utilisant une version C^∞ de d satisfaisant une équation eiconale plus forte. C'est ce que l'on met en place dans le lemme général suivant.

■ **8.7. Lemme.** Soit \tilde{V} une fonction $W^{1,\infty}$ sur un intervalle $\Omega \subset [a; b]$. Soit $\lambda < \Lambda_0 := \inf_\Omega \tilde{V}$. Considérons la distance d'Agmon d définie par

$$\forall x, y \in \Omega, \quad x \leq y \quad d(x, y) := \int_x^y \sqrt{(\tilde{V}(\sigma) - W^h(\sigma) - \lambda)_+} d\sigma. \quad (8.2.2)$$

⁹Pour la distance usuelle.

¹⁰Pour la distance usuelle encore !

Alors, si $p \in [a; b]$ est un point fixé, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe une fonction $\varphi_p \in C^2(\Omega)$ vérifiant pour tout $h > 0$ assez petit

$$\inf_{x \in \Omega} \tilde{\mathcal{V}}(x) - \varphi_p^2 - \Lambda^* \geq c > 0, \quad (8.2.3)$$

et telle que

$$\sup_{x \in \Omega} |d(x; p) - \varphi_p(x)| < \varepsilon. \quad (8.2.4)$$

Preuve. L'idée est assez simple : étant donné $\varepsilon > 0$, pour le potentiel $\tilde{\mathcal{V}} + \varepsilon$, la condition (14.2.1) est satisfaite pour $\varphi = d(\cdot, p)$. Ce potentiel approche à ε près la fonction $\tilde{\mathcal{V}} - W^h$ sauf dans U^h , dont le diamètre euclidien tend vers 0. L'approximation sera donc uniforme sur Ω pour $h > 0$ assez petit.

Comme par hypothèse $\Lambda_0 - \lambda > 0$, on peut supposer, quitte à réduire ε , que l'on a $0 < \varepsilon < \Lambda_0 - \lambda$. On considère alors la fonction définie par

$$\forall x \in \Omega, \quad x \geq p, \quad \tilde{d}(x) := \int_p^x \sqrt{\left(\tilde{\mathcal{V}}(\sigma) + \varepsilon - \lambda\right)_+} d\sigma, \quad (8.2.5)$$

(si $x \leq p$, échanger les bornes dans la définition de \tilde{d}). Noter aussi que l'argument de la racine est strictement positif. La fonction \tilde{d} est continue et même C^1 sur Ω et on a

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{V}}(x) - \lambda - (\partial_x \tilde{d})^2 &= (\tilde{\mathcal{V}}(x) - \lambda) - (\tilde{\mathcal{V}}(x) + \varepsilon)_+ \\ &= \tilde{\mathcal{V}}(x) - \lambda - (\tilde{\mathcal{V}}(x) + \varepsilon - \lambda) \\ &= \varepsilon > 0. \end{aligned}$$

Par ailleurs on a :

$$\begin{aligned} \forall x \in \Omega, \quad |d(p; x) - \tilde{d}(x)| &= \left| \int_p^x (\partial_x d)(s) - (\partial_x \tilde{d})(s) ds \right| \\ &\leq \int_a^b \left| (\partial_x d)(s) - (\partial_x \tilde{d})(s) \right| ds \end{aligned}$$

On découpe l'intégrale en

$$\int_{\Omega} \left| (\partial_x d)(s) - (\partial_x \tilde{d})(s) \right| ds = \int_{\Omega - U^h} + \int_{U^h} \left| (\partial_x d)(s) - (\partial_x \tilde{d})(s) \right| ds,$$

et on voit par définition de d (cf. 8.2.2) que la première intégrale se majore par $C\varepsilon$ à l'aide des accroissements finis tandis que l'intégrande du second terme se majore grossièrement par Ch . Ainsi on obtient pour h assez petit

$$\sup_{\Omega} |d(p; \cdot) - \tilde{d}(\cdot)| \leq C\varepsilon,$$

et la fonction \tilde{d} satisfait (14.2.1). Il reste à la régulariser. Quitte à supposer au départ ε encore plus petit, supposons que

$$\sup_{\Omega} |d(p; \cdot) - \tilde{d}| \leq \varepsilon/2. \quad (8.2.6)$$

Si l'on veut de plus que \tilde{d} soit C^∞ , il suffit d'approcher $(\partial_x \tilde{d})$ par une fonction lisse ξ (ce qui est possible car $(\partial_x \tilde{d})$ est continue) telle que

$$\sup |\xi - (\partial_x \tilde{d})| \leq \frac{\varepsilon}{2(1 + 2 \sup |(\partial_x \tilde{d})|)}, \quad (8.2.7)$$

Ensuite on écrit

$$\tilde{\mathcal{V}} - \lambda - \xi^2 = \tilde{\mathcal{V}} - \lambda - (\partial_x \tilde{d})^2 - (\xi^2 - (\partial_x \tilde{d})^2),$$

et utilisant l'identité

$$X^2 - Y^2 = (X - Y)(2Y + (X - Y)),$$

on obtient

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{V}} - \lambda - \xi^2 &\geq \tilde{\mathcal{V}} - \lambda - (\partial_x \tilde{d})^2 - |\xi - (\partial_x \tilde{d})|(2|(\partial_x \tilde{d})|_\infty + |\xi - (\partial_x \tilde{d})|_\infty) \\ &\geq \tilde{\mathcal{V}} - \lambda - (\partial_x \tilde{d})^2 - |\xi - (\partial_x \tilde{d})|(2|(\partial_x \tilde{d})|_\infty + 1) \\ &\geq \varepsilon - \varepsilon/2, \end{aligned}$$

et enfin la fonction

$$\varphi_p(x) := \left| \int_p^x \xi(s) ds \right|$$

convient ■

8.8. Remarque.

1. On peut remplacer le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}$ par une famille $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ de potentiels pourvu que celle-ci soit bornée dans L^∞ et que λ soit choisi de sorte que

$$\lambda < \inf_{h>0} \inf_{\Omega} \tilde{\mathcal{V}}^h.$$

2. Noter également que si $\lambda_1 \leq \lambda_2$ sont deux réels satisfaisant la condition ci-dessus, on a dans ce cas pour tout $\sigma \in I$

$$\sqrt{(\tilde{\mathcal{V}}(\sigma) - W^h(\sigma) - \lambda_1)_+} \geq \sqrt{(\tilde{\mathcal{V}}(\sigma) - W^h(\sigma) - \lambda_2)_+},$$

si bien qu'avec des notations évidentes, on a

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \Rightarrow \forall p \in I, \quad \forall x \in I, \quad d_2(x, p) \leq d_1(x, p) \quad (8.2.8)$$

remarque qui sera utile afin d'obtenir des estimations uniformes lorsque λ décrit un petit domaine d'énergie.

8.3 Corollaires directs

On peut déjà tirer des conséquences de ces remarques. On reprend les notations du lemme 8.1.

■ **8.9. Corollaire.** Soit \mathcal{V} un potentiel L^∞ sur un intervalle $\Omega =]\alpha; \beta[\subset I$, λ un réel, u est une fonction de $H^2(\Omega)$, et φ une fonction lipschitzienne sur Ω satisfaisant

$$\inf_{x \in \text{supp } u} \mathcal{V} - \varphi'^2 - \lambda \geq m > 0. \quad (8.3.1)$$

Supposons que $f := (-h^2 u'' + \mathcal{V} - z)u \in L^p(\Omega)$, $p \in [1; \infty]$, et soit q tel que $1/p + 1/q = 1$. Alors on a

$$\begin{aligned} |h(e^{\frac{\varphi}{h}} u)'|_{L^2}^2 + \frac{m}{2} |e^{\frac{\varphi}{h}} u|_{L^2}^2 &\leq \|e^{\frac{2\varphi}{h}} f\|_{L^p} \|u\|_{L^q} \\ &\leq h^2 e^{2\varphi(\alpha)/h} |Re[u'(\alpha)\bar{u}(\alpha)]| \\ &\quad + h^2 e^{2\varphi(\beta)/h} |Re[u'(\beta)\bar{u}(\beta)]|. \end{aligned}$$

8.10. Remarque. Il suffit en effet que l'hypothèse (8.3.2) soit satisfaite sur le support de u , puisque l'opérateur $P(h)$ est local.

Preuve. Il suffit d'appliquer l'identité de départ. Toutes les expressions ont bien un sens puisque u est C^1 d'après l'injection $H^2 \hookrightarrow C^1$. ■

■ **8.11. Corollaire.** Si \mathcal{V} est un potentiel L^∞ sur un intervalle $\Omega =]\alpha; \beta[\subset I$, λ un réel, u est une fonction de $H^2(\Omega)$, et φ une fonction lipschitzienne sur Ω satisfaisant

$$\inf_{x \in \text{supp } u} \mathcal{V} - \varphi'^2 - \lambda \geq m > 0, \quad (8.3.2)$$

alors on a

$$\begin{aligned} |h(e^{\frac{\varphi}{h}} u)'|_{L^2}^2 + \frac{m}{2} |e^{\frac{\varphi}{h}} u|_{L^2}^2 &\leq \frac{1}{2m} |e^{\frac{\varphi}{h}} (-h^2 u'' + \mathcal{V} - z)u|_{L^2} \\ &\leq h^2 e^{2\varphi(\alpha)/h} |Re[u'(\alpha)\bar{u}(\alpha)]| \\ &\quad + h^2 e^{2\varphi(\beta)/h} |Re[u'(\beta)\bar{u}(\beta)]|. \end{aligned}$$

Preuve. Posons $f := (-h^2 u'' + \mathcal{V} - z)u$, $F = \mathcal{V} - \varphi'^2 - \lambda$, et appliquons le lemme 8.1 avec $z = \lambda$, $u_1 = u_2 = u$. Cela donne :

$$\begin{aligned} \int_{\alpha}^{\beta} e^{2\varphi/h} f u &= \int_{\alpha}^{\beta} (h e^{\varphi/h} u)'^2 dx + \int_{\alpha}^{\beta} (\mathcal{V} - z - \varphi'^2) (e^{\varphi/h} u)^2 dx \\ &+ h^2 e^{2\varphi(\alpha)/h} u'(\alpha) \bar{u}(\alpha) \\ &- h^2 e^{2\varphi(\beta)/h} u'(\beta) \bar{u}(\beta). \end{aligned}$$

Noter que la première ligne du membre de droite de l'équation ci-dessus est un nombre réel. On prend les parties réelles, ce qui donne

$$\begin{aligned} \int_{\alpha}^{\beta} (h e^{\varphi/h} u)'^2 dx + \int_{\alpha}^{\beta} (\mathcal{V} - z - \varphi'^2) (e^{\varphi/h} u)^2 dx &\leq \int_{\alpha}^{\beta} |e^{\varphi/h} f| |e^{\varphi/h} u F| \frac{dx}{F} \\ &+ h^2 e^{2\varphi(\alpha)/h} |Re[u'(\alpha) \bar{u}(\alpha)]| \\ &+ h^2 e^{2\varphi(\beta)/h} |Re[u'(\beta) \bar{u}(\beta)]|. \end{aligned}$$

Par ailleurs l'inégalité de Cauchy-Schwarz donne pour le membre de droite de la dernière inégalité :

$$\begin{aligned} \int_{\alpha}^{\beta} |e^{\varphi/h} f| |e^{\varphi/h} u F| \frac{dx}{F} &\leq \frac{1}{m} \left| e^{\varphi/h} f \right|_{L^2} |e^{\varphi/h} u F|_{L^2} \\ &\leq \frac{1}{2m} \left(|e^{\varphi/h} f|_{L^2}^2 + |e^{\varphi/h} u F|_{L^2}^2 \right), \end{aligned}$$

tandis que l'on a la minoration du membre de gauche

$$\int_{\alpha}^{\beta} (h e^{\varphi/h} u)'^2 dx + \int_{\alpha}^{\beta} (\mathcal{V} - z - \varphi'^2) (e^{\varphi/h} u)^2 dx \geq |h(e^{\varphi/h} u)'|_{L^2}^2 + m |e^{\varphi/h} u|_{L^2}^2.$$

Mettant bout à bout ces estimations on obtient :

$$\begin{aligned} |h(e^{\varphi/h} u)'|_{L^2}^2 + m |e^{\varphi/h} u|_{L^2}^2 - \frac{1}{2m} |e^{\varphi/h} u F|_{L^2}^2 &\leq h^2 e^{2\varphi(\alpha)/h} |Re[u'(\alpha) \bar{u}(\alpha)]| \\ &+ h^2 e^{2\varphi(\beta)/h} |Re[u'(\beta) \bar{u}(\beta)]| \\ &+ \frac{1}{2m} |e^{\varphi/h} f|_{L^2}^2, \end{aligned}$$

d'où le résultat. ■

8.12. Remarque.

1. Ici aussi, on peut remplacer le potentiel \mathcal{V} par une famille de fonctions $(\mathcal{V}^h)_{h>0}$ satisfaisant l'hypothèse (8.3.2) avec une constante m indépendante de $h > 0$.
2. Ainsi le contrôle des valeurs au bord de u et u' permet d'estimer la taille de u dans l'île en fonction de Pu .

Méthodes d'analyse fonctionnelle

Le premier outil introduit est un outil souple de calcul fonctionnel, puisqu'il s'agit de la formule de Dynkin-Helffer-Sjöstrand. Le second outil relève de méthodes Hilbertiennes, il s'agit de la distance en sous-espaces d'un espace de Hilbert. Dans notre cas, il permet d'approcher les sous-espaces spectraux de Hamiltoniens de Dirichlet. Enfin, on fait de brefs rappels sur les propriétés des opérateurs à trace que l'on manipulera souvent par la suite. Notamment on énonce le théorème de Mercer. L'étude des traces fait l'objet du chapitre suivant.

9.1 Calcul fonctionnel

On introduit la formule de Helffer-Sjöstrand qui permet avec une certaine flexibilité d'estimer des fonctions du Hamiltonien à l'aide de sa résolvante. Il s'agit d'une version opérateurs de la formule de Cauchy-Pompeiu. Cette section n'est utile qu'au lecteur peu familier avec cette formule. Noter que par cette approche on peut définir le calcul fonctionnel auto-adjoint, voir notamment [Da].

■ **9.1. Lemme.** *Soit θ une fonction C^∞ à support compact dans \mathbb{R} . Alors il existe une fonction $\tilde{\theta} \in C_c^\infty(\mathbb{C})$ telle que :*

$$\begin{aligned} i) \quad & \tilde{\theta}|_{\mathbb{R}} = \theta. \\ ii) \quad & \forall n \in \mathbb{N}, \quad \left| \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \bar{z}}(z) \right| = \mathcal{O}_N(|\operatorname{Im} z|^N). \end{aligned}$$

■ **9.2. Définition.** *une telle fonction sera appelée extension presque analytique de θ .*

Ainsi la fonction $\partial_{\bar{z}}\theta$ s'annule à l'ordre infini sur l'axe réel.

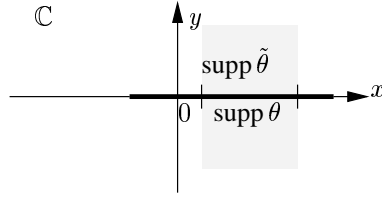


Figure 9.1. Supports de θ et de son extension presque analytique.

Une telle extension se construit par exemple par un procédé de sommation de type Borel :

$$\tilde{\theta}(x + iy) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(iy)^N}{n!} \theta^{(n)}(x) \Phi\left(\frac{y}{\epsilon_n}\right),$$

où Φ est une fonction plateau au voisinage de $x = 0$ et (ϵ_n) une suite décroissant suffisamment vite vers zéro. Si on a besoin d'une annulation à l'ordre N_0 seulement, on peut considérer la N_0 -ème somme partielle de la série définie ci-dessous. On a alors

■ 9.3. Théorème. (Dynkin-Helffer-Sjöstrand) Soit $\theta \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ et $\tilde{\theta}$ une extension presque analytique de θ . Soit A un opérateur non-borné auto-adjoint sur un espace de Hilbert \mathcal{H} . Alors on a :

$$\theta(A) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \bar{z}}(z) (z - A)^{-1} dz \wedge \bar{z},$$

l'intégrale étant convergente dans $\mathcal{L}(\mathcal{H})$.

9.2 Distance entre sous-espaces

L'objet de cette partie est de rappeler un résultat permettant de localiser le spectre d'un opérateur par un principe de comparaison. Les notions définies ici ainsi que le théorème 9.7 proviennent de [HeSj2] ou [He]. Pour les démonstrations, se reporter à [HeSj2], ou encore [DiSj].

■ 9.4. Définition. Soit E et F deux sous-espaces fermés d'un espace de Hilbert \mathcal{H} . Soit Π_E et Π_F les projecteurs orthogonaux sur E et F respectivement. On définit la distance de E à F (attention à l'ordre, ce n'est pas une distance symétrique), notée $\vec{d}(E; F)$ par :

$$\vec{d}(E; F) := \|(1 - \Pi_F)\Pi_E\|.$$

9.5. Remarque. On a les propriétés suivantes :

1. $\vec{d}(E; F)$ est la norme de la restriction à E du projecteur orthogonal sur F^\perp , et $0 \leq \vec{d}(E; F) \leq 1$.
2. $\vec{d}(E; F) = 0$ si et seulement si $E \subset F$.
3. Si G est un troisième sous-espace fermé de \mathcal{H} , on a une inégalité triangulaire :
$$\vec{d}(F; G) \leq \vec{d}(E; F) + \vec{d}(F; G)$$
4. Si $\vec{d}(E; F) \leq \varepsilon$, alors pour tout vecteur $u \in E$, on a $|u - \Pi_F u| \leq \varepsilon|u|$. Autrement dit, u est proche d'un vecteur de F .

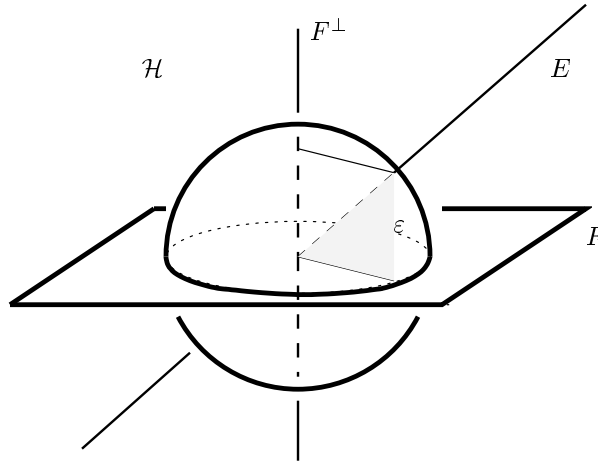


Figure 9.2. La norme d'un projecteur est le diamètre du projeté de la sphère unité. Ici $\vec{d}(E; F) = \varepsilon$.

On a la propriété suivante :

■ **9.6. Proposition.** Si $\varepsilon := \vec{d}(E; F) < 1$, alors la restriction de Π_F à E induit un isomorphisme linéaire sur son image d'inverse continu. De plus, si par ailleurs, on a $\vec{d}(F; E) < 1$, alors les deux distances en question sont égales. En particulier E et F sont de mêmes dimensions.

En particulier E s'injecte dans F via l'application Π . L'intérêt de cette notion de distance réside dans le principe suivant de localisation du spectre :

■ **9.7. Théorème.** Soit A un opérateur auto-adjoint non borné sur un espace de Hilbert \mathcal{H} et $\Lambda := [\Lambda_-; \Lambda_+]$ un intervalle compact de \mathbb{R} . On suppose qu'il existe N vecteurs $\psi_1 \dots \psi_N$ linéairement indépendants

dans le domaine de A et $\mu_1 \dots \mu_N$ des nombres complexes dans Λ tels que :

$$\forall j = 1..N, \quad A\psi_j = \mu_j\psi_j + r_j,$$

avec

$$|r_j| \leq \varepsilon.$$

On suppose que :

$$\exists a > 0, \quad \sigma(A) \cap ([\Lambda_- - a; \Lambda_-] \cup [\Lambda_+; \Lambda_+ + a]) = \emptyset. \quad (9.2.1)$$

Alors en notant E le sous-espace engendré par les ψ_j et F le sous-espace spectral de A associé à $\sigma(A) \cap \Lambda$, on a

$$\vec{d}(E; F) \leq \left(\frac{N}{\rho_*}\right)^{1/2} \frac{\varepsilon}{a}, \quad (9.2.2)$$

où ρ_* désigne la plus petite valeur propre de la matrice de Gram

$$M := (\langle \psi_i, \psi_j \rangle)_{i,j}$$

9.8. Remarque.

1. L'opérateur A étant auto-adjoint, des vecteurs propres approchés linéairement indépendants doivent être quasiment orthogonaux (dans le cas de sous-espaces propres de dimension u par exemple). Les valeurs propres de la matrice de Gram mesurent le défaut d'orthogonalité entre ces vecteurs, ce qui explique la présence du facteur $\rho_*^{-1/2}$: ρ_* est le plus petit angle entre les vecteurs ψ_j .
2. L'hypothèse (9.2.1) garantit qu'il n'y a pas de spectre sur les bords de $[\Lambda_-; \Lambda_+]$.
3. Le théorème dit en particulier que si $\sigma(A) \cap I$ est discret (ce qui est le cas pour le problème de Dirichlet) et si le membre de droite de (9.2.2) est strictement inférieur à 1, alors F est au moins de dimension N : ainsi A possède au moins N valeurs propres dans $[\Lambda_-; \Lambda_+]$.

9.3 Opérateurs à trace

Cette notion est bien connue, il serait inutile dans le cadre de cette thèse de refaire la théorie. On renvoie le lecteur à [ReSi3], ou à l'appendice de [Shu].

Rappelons seulement les deux résultats suivants qui seront souvent utilisés.

■ **9.9. Proposition.** (Cyclicité de la trace). Soit A et B deux opérateurs bornés sur un espace de Hilbert \mathcal{H} , A étant à trace, et B étant borné. Alors on a

$$\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA).$$

■ **9.10. Théorème.**(Mercer). Soit $K(x, y)$ une fonction continue sur $[a; b] \times [a; b]$, et T_K l'opérateur intégral borné sur $L^2(a; b)$ associé. On suppose que T_K est auto-adjoint et positif. Alors T_K est à trace et on a de plus

$$\text{Tr}[T_K] = \int_{[a; b]} K(x, x) dx.$$

Traces. Densité d'états locale

Le calcul de traces est récurrent en mécanique quantique puisqu'il permet d'exprimer les valeurs moyennes d'observables pour un système quantique dont l'état n'est connu que statistiquement. Ici, on montre que pour les problèmes qui nous intéressent, tels que l'évaluation de fonctions de l'énergie, elles ont un sens. Cela permet d'obtenir notamment une première majoration de la densité d'états locale (cor. 10.13), et avec le principe de monotonie rappelé (prop. 10.5) des estimations *a priori* utiles pour le problème non-linéaire.

10.1 Définition

Ici, H désigne un Hamiltonien sur $L^2(\Omega)$, Ω étant un segment de \mathbb{R} ou $\Omega = \mathbb{R}$.

■ **10.1. Définition.** Soit $\theta \in C_c^0(\mathbb{R})$, On appellera traces locales de $\theta(H)$ les quantités, lorsqu'elles ont un sens, définies par :

$$L_\theta(\varphi) := \text{Tr} [\theta(H)\varphi(x)], \quad \varphi \in C_c^0(\Omega).$$

10.2. Remarque.

1. Ainsi, $L_\theta(\varphi)$ mesure la valeur moyenne de l'observable $\theta(H)\varphi$.
2. Noter que pour $\theta \geq 0$ fixée et $\varphi \geq 0$, on a formellement :

$$\begin{aligned} L_\theta(\varphi) &= \text{Tr} [\theta(H)\varphi^{\frac{1}{2}}\varphi^{\frac{1}{2}}] \\ &= \text{Tr} [\varphi^{\frac{1}{2}}\theta(H)\varphi^{\frac{1}{2}}] \\ &= \text{Tr} [\varphi^{\frac{1}{2}}\theta(H)^{\frac{1}{2}}(\theta(H)^{\frac{1}{2}}\varphi^{\frac{1}{2}})] \\ &= \text{Tr} [(\theta^{\frac{1}{2}}(H)\varphi^{\frac{1}{2}})^*(\theta^{\frac{1}{2}}(H)\varphi^{\frac{1}{2}})] \\ &\geq 0, \end{aligned}$$

si bien que par dualité la fonctionnelle $\varphi \mapsto L_\theta(\varphi)$ définit une mesure positive sur Ω .

10.2 Estimations traces

Les résultats qui suivent s'appliquent à une classe assez générale de potentiels. On commence par un lemme qui sera à plusieurs reprises utile par la suite.

■ **10.3. Lemme.** *Soit $\Omega = \mathbb{R}$ ou Ω un segment de \mathbb{R} . Soit $(\nu^h)_{h>0}$ une famille de potentiels uniformément bornée dans $L^\infty(\Omega)$ et deux fonctions à supports compacts, $\theta \in C^\infty$ et $\varphi \in L^\infty(\Omega)$. Notons $P(\nu^h)$ l'opérateur différentiel*

$$P(\nu^h) := -h^2 d^2/dx^2 + \nu^h,$$

et soit A_{ν^h} sa réalisation auto-adjointe sur $L^2(\Omega)$ de domaine $H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$.

Alors pour tout $z \notin \mathbb{R}$ l'opérateur $(A_{\nu^h} - z)^{-1}\varphi(x)$ est à trace et on a l'estimation suivante :

$$\|(A_{\nu^h} - z)^{-1}\varphi\|_1 \leq \frac{C}{|Im\, z|} h^{-2} \cdot |\varphi|_\infty,$$

la constante C ne dépendant pas de $h > 0$.

Preuve. On écrit que

$$(z - A_{\nu^h})^{-1}\varphi = [(z - A_{\nu^h})^{-1}(z - A_0)][(z - A_0)^{-1}\varphi],$$

où A_0 désigne l'opérateur A_{ν^h} pour $\nu^h \equiv 0$ (c'est le Laplacien standard).

Le premier facteur, après avoir noté que, $A_{\nu^h} = A_0 + \nu^h$, se réécrit $Id - (z - A_0)^{-1}\nu^h$, et est donc contrôlé en norme d'opérateur d'après le calcul fonctionnel par $C \sup_h \|\nu^h\|_\infty / |Im\, z|$, C indépendante de h .

Quant au second terme, on montre que c'est un opérateur à trace. On distingue suivant que $\Omega = \mathbb{R}$ ou que Ω est borné : dans le dernier cas, on connaît le spectre de A_0 . C'est une suite $\{\alpha_n(h)\}_{n \in \mathbb{N}^*}$ donnée par

$$\sigma(A_0) = \{\alpha_n(h)\}_{n \in \mathbb{N}^*}, \quad \text{où} \quad \alpha_n(h) = \frac{\pi^2}{|\Omega|^2} n^2 h^2 \quad \forall n \in \mathbb{N}^*$$

$|\Omega|$ désignant le diamètre de Ω . Par le théorème spectral, on déduit que l'opérateur $|(z - A_0)^{-1}|$ est donné par une série de projecteurs orthogonaux de rang 1, et ses valeurs singulières sont les

$$s_n(h) := |z - \alpha(n)|^{-1},$$

suite manifestement ℓ^1 , ce qui montre que $(z - A_0)^{-1}$ est à trace.

Quant au problème sur la droite, il suffit de noter que l'opérateur $(z - A_0)^{-1}\varphi$ est de la forme $g(-ih\nabla)f(x)$, et d'utiliser le théorème XI.20 de [ReSi3] p. 47 avec $\delta \in]1/2; 2/3[$. On obtient alors que l'opérateur $[(z - A_0)^{-1}\varphi]$ est à trace avec l'estimation suivante :

$$\|[(z - A_0)^{-1}\varphi]\|_1 \leq Ch^{-1/2}|\varphi|_\infty, \quad (10.2.1)$$

ce qui prouve lemme. ■

■ **10.4. Proposition.** Soit $\Omega = \mathbb{R}$ ou Ω un segment de \mathbb{R} . Soit $(\nu^h)_{h>0}$ une famille de potentiels uniformément bornée dans $L^\infty(\Omega)$ et deux fonctions à supports compacts, $\theta \in C^\infty$ et $\varphi \in L^\infty(\Omega)$. Notons $P(\nu^h)$ l'opérateur différentiel

$$P(\nu^h) := -h^2 d^2/dx^2 + \nu^h,$$

et soit A_{ν^h} sa réalisation auto-adjointe sur $L^2(\Omega)$ de domaine $H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$.

Alors l'opérateur $\theta(A_{\nu^h})\varphi(x)$ est à trace et on a l'estimation suivante :

$$\|\theta(A_{\nu^h})\varphi\|_1 \leq Ch^{-2}|\theta|_{C^1} \cdot |\varphi|_\infty,$$

la constante C ne dépendant pas de $h > 0$.

10.5. Remarque.

1. Noter en effet que $P(\nu^h)$ est semi-borné, la proposition a bien un sens.
2. Dans les cas qui nous intéressent, on verra que l'on peut sensiblement améliorer cette estimation assez grossière (cf. proposition 10.11 et corollaire 14.8 p.166).

Preuve. D'après la formule de Helffer-Sjöstrand (théorème 9.3 p. 96), on a

$$\begin{aligned} \theta(A_{\nu^h})\varphi &= \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \bar{z}}(z)(z - A_{\nu^h})^{-1} dz \wedge d\bar{z} \cdot \varphi \\ &= \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \bar{z}}(z)(z - A_{\nu^h})^{-1} \varphi dz \wedge d\bar{z}, \end{aligned}$$

la dernière égalité par continuité de l'intégrale. Noter que cette intégrale est en fait à support compact, parce que $\tilde{\theta}$ est à support compact. D'après le lemme 10.3, et la définition de l'extension presque analytique, l'intégrande pour z non réel, est contrôlée par (distinguer suivant que $|Im z| \lesseqgtr 1$) en norme trace par $Ch^{-2}|\theta|_{C^1} \cdot |\varphi|_\infty$. Il suffit ensuite d'intégrer sur le support de $\tilde{\theta}$. ■

■ **10.6. Corollaire.** Soit $\Omega = \mathbb{R}$ ou Ω un segment de \mathbb{R} . Soit $\theta \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ une fonction positive donnée, ν un potentiel $\in L^\infty(\Omega)$, et A_ν la réalisation auto-adjointe sur $L^2(\Omega)$ et de domaine $H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ de l'opérateur

$$-h^2 d^2/dx^2 + \nu.$$

Alors l'application suivante :

$$C_c(\Omega) \longrightarrow \mathbb{R}, \quad \varphi \mapsto L(\varphi) := \text{Tr}[\theta(A_\nu)\varphi]$$

est bien définie et définit une mesure de Radon positive.

Preuve. D'après la proposition précédente, $L(\varphi)$ est bien définie et continue. Montrons que si $\varphi \geq 0$, $L(\varphi) \geq 0$, ce qui montrera la positivité. Le calcul formel de la remarque 2. est licite puisque $\theta(A_\nu)\varphi^{\frac{1}{2}}$ est à trace, tandis que [la multiplication par] $\varphi^{\frac{1}{2}}$ est [un opérateur] borné (sur $L^2(\Omega)$), ce qui permet d'utiliser la cyclicité de la trace et d'achever le calcul. ■

10.7. Remarque. D'après la proposition, la fonctionnelle $\varphi, \theta \mapsto \text{Tr}[\chi(A_{\nu^h})\varphi]$ définit par extension une distribution d'ordre 1 (utiliser la densité des produits tensoriels $\theta \otimes \varphi$). Par ailleurs, si θ est positive également, la quantité $\text{Tr}[\chi(A_{\nu^h})\varphi]$ est positive. On définit ainsi par extension une mesure positive sur $\mathbb{R} \times \Omega$.

■ **10.8. Notation.** Soit $\Omega = \mathbb{R}$ ou Ω un segment de \mathbb{R} . Soit ν un potentiel dans $L^\infty(\Omega)$, et notons A_ν la réalisation auto-adjointe sur $L^2(\Omega)$ et de domaine $H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ de l'opérateur

$$-h^2 d^2/dx^2 + \nu.$$

Pour $\theta \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ une fonction positive donnée, on notera $dn_\theta[A_\nu]$ la mesure de Radon positive définie par

$$\forall \varphi \in C_c(\Omega), \quad \text{Tr}[\theta(A_\nu)\varphi] \equiv \int_\Omega \varphi \, dn_\theta[A_\nu].$$

■ **10.9. Définition.** La fonction θ étant fixée, on appellera densité de particules la mesure $dn_\theta[A_\nu]$.

10.10. Remarque. Si le hamiltonien A_ν est celui d'un système quantique, la mesure $dn_\theta[A_\nu]$ donne la valeur moyenne de l'observable classique $\theta(E)\varphi(x)$, où E désigne l'énergie (classique) du système.

■ **10.11. Proposition.** Soit $\Omega = \mathbb{R}$ ou Ω un segment de \mathbb{R} contenant l'intervalle $]a, b[$. Soit $(\tilde{\nu}^h)_{h>0}$ une famille de potentiels uniformément bornée dans $L^\infty(\Omega)$, $\nu^h := \nu^h - W^h$, et $A_{\tilde{\nu}^h}$ (resp. A_{ν^h}) la réalisation de Dirichlet sur $L^2(\Omega)$ de

$$-h^2 d^2/dx^2 + \tilde{\nu}^h \quad (\text{resp.} \quad -h^2 d^2/dx^2 + \nu^h).$$

Alors, pour tout compact $K \subset \mathbb{R}$, il existe une constante C_K indépendante de $h > 0$ telle que

$$0 \leq \int_K dn_\theta[A_{\nu^h}] \leq \int_K dn_\theta[A_{\tilde{\nu}^h}] + C_K.$$

Preuve. La seconde formule de la résolvante donne pour $z \in \mathbb{C}$ non réel

$$(z - A_{\nu^h})^{-1} \mathbb{1}_K - (z - A_{\tilde{\nu}^h})^{-1} \mathbb{1}_K = (z - A_{\nu^h})^{-1} W(x/h) (z - \tilde{A}_{\nu^h})^{-1} \mathbb{1}_K,$$

sur $L^2(\Omega)$. Le membre de droite se récrit, en notant A_0 la réalisation de Dirichlet de $-h^2 d^2/dx^2$:

$$(z - A_{\nu^h})^{-1} [W(x/h) (z - A_0)^{-1}] [(z - A_0) (z - A_{\tilde{\nu}^h})^{-1}] \mathbb{1}_K.$$

Comme dans la preuve du lemme 10.3, le premier facteur est $\mathcal{O}(|\text{Im } z|^{-1})$, et le dernier est borné indépendamment de $h > 0$ par $C\langle z \rangle |\text{Im } z|^{-1}$. Quant au facteur du milieu, il est unitairement équivalent par l'isométrie de L^2 induite par $x \mapsto x/h$ à l'opérateur $W(z + \Delta)^{-1}$, qui est à trace et de norme trace bornée indépendamment de $h > 0$ (utiliser encore le théorème spectral ou le théorème XI.20 de [ReSi3] p. 47 suivant que Ω est borné ou non). Il ne reste plus qu'à appliquer la formule de Helffer-Sjöstrand (théorème 9.3) pour conclure. ■

10.3 Calcul explicite dans le cas de la barrière de potentiel

Il est aisé d'obtenir une expression de la densité d'états locale pour $H_I(h)$ le Hamiltonien au potentiel constant sur I , puisque l'on a calculé ses fonctions propres généralisées. Rappelons que :

$$D(H_{|}(h)) = H^2(\mathbb{R}), \quad H_{|}(h)u := -h^2 u'' + V_{|}u, \quad (10.3.1)$$

où $V_{|} \in L^\infty$ est donné par (cf. figure 10.1) :

$$V_{|}(x) = \Lambda_0 \cdot \mathbb{1}_{[a;b]}(x) + \mathcal{B}(x - b),$$

et que l'expression des fonctions propres généralisées est donnée par les équations (6.3.9)-(6.3.10) p. 67.

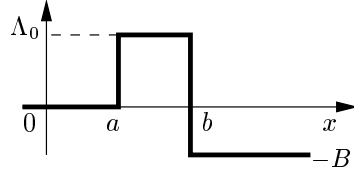


Figure 10.1. Hamiltonien pour le potentiel $V_{|}$.

On a alors :

■ **10.12. Proposition.** Soit $F \in C_c^0(-\infty; \Lambda^*)$, et $K \subset [a; b]$ intervalle compact. Alors, pour toute fonction $\varphi \in C_c^0(K)$ positive, l'opérateur $F(H_{|}(h))\varphi$ est à trace et on a l'estimation :

$$\|F(H_{|}(h))\varphi\|_{\mathcal{L}^1} = \mathcal{O}(e^{-2d_*(\partial I, \partial K)/h}) \|F\|_\infty \|\varphi\|_\infty, \quad h \rightarrow 0,$$

d_* désignant la distance d'Agmon à l'énergie Λ_* pour le potentiel $V_{|}$.

En particulier, la famille de mesures $(dn_F[H_{|}(h)])_{h>0}$ est bornée et converge faiblement, à extraction près, vers une mesure positive atomique chargeant le bord de l'île ∂I .

Preuve. Le fait que l'opérateur en question est à trace découle de la proposition 10.4 appliquée à $\nu^h \equiv V_{|} \in L^\infty$. Notons ensuite que la dernière assertion découle de l'estimation de la proposition appliquée avec $\varphi = \mathbb{1}_K$, pour $K \subset]a; b[$ un compact quelconque. Il en découle que lorsque h tend vers zéro, le support de la mesure est contenu dans ∂I . Il reste à établir l'estimation en question. Pour cela, on fixe une fonction φ continue et positive ou nulle sur I . On utilise ensuite la cyclicité de la trace, et que dans cette situation, l'opérateur $F(H_{|}(h))\varphi^{1/2}$ est à trace (encore la proposition 10.4). Cela donne

$$\begin{aligned} \text{Tr}[F(H_{|}(h))\varphi] &= \text{Tr}[F(H_{|}(h))\varphi^{1/2} \cdot \varphi^{1/2}] \\ &= \text{Tr}[\varphi^{1/2} F(H_{|}(h))\varphi^{1/2}], \end{aligned}$$

puis écrivant que $F = F^{1/2}F^{1/2}$ et d'après le calcul fonctionnel, en posant

$$T := F^{1/2}(H|_I(h))\varphi^{1/2},$$

on obtient que :

$$\mathrm{Tr}[F(H|_I(h))\varphi] = \mathrm{Tr}(T^*T).$$

On est donc ramené à calculer la trace d'un opérateur borné auto-adjoint positif. Mais l'opérateur $T^*T = \varphi^{1/2}F(H|_I(h))\varphi^{1/2} =: K$ est un opérateur intégral à noyau continu sur $[a; b] \times [a; b]$. En outre, le noyau est donné par

$$\begin{aligned} K[x, y] &= \varphi^{1/2}(x) \int_{k \in \mathbb{R}, \lambda(k) \neq 0} F(\lambda(k)) \psi_-(k, x) \overline{\psi_-(k, y)} \frac{dk}{2\pi h} \varphi^{1/2}(y) \\ &= \varphi^{1/2}(x) \int_{k > 0} F(\lambda(k)) \psi_-(k, x) \overline{\psi_-(k, y)} \frac{dk}{2\pi h} \varphi^{1/2}(y) \\ &+ \varphi^{1/2}(x) \int_{k < 0, k^2 \neq B} F(\lambda(k)) \psi_-(k, x) \overline{\psi_-(k, y)} \frac{dk}{2\pi h} \varphi^{1/2}(y), \end{aligned}$$

puis, posant le changement de variables $\lambda = \lambda(k)$ dans les intégrales, on obtient :

$$\begin{aligned} K[x, y] &= \varphi^{1/2}(x) \int_{\lambda > 0} F(\lambda) \frac{\psi_-(\sqrt{\lambda}, x) \overline{\psi_-(\sqrt{\lambda}, y)}}{\sqrt{\lambda}} \frac{d\lambda}{4\pi h} \varphi^{1/2}(y) \\ &+ \varphi^{1/2}(x) \int_{\lambda > -B} F(\lambda) \frac{\psi_-(-\sqrt{\lambda+B}, x) \overline{\psi_-(-\sqrt{\lambda+B}, y)}}{\sqrt{\lambda+B}} \frac{d\lambda}{4\pi h} \varphi^{1/2}(y). \end{aligned}$$

Apparemment, l'intégrande présente des singularités en λ , mais il suffit de revenir aux expressions (6.3.9)-(6.3.10) p. 67 des fonctions $\psi_-(\cdot, x)$, pour lever ces singularités, puisque l'on voit que

$$\frac{|\psi_-(\sqrt{\lambda}, x)|^2}{4\pi\sqrt{\lambda}} = \frac{\sqrt{\lambda}}{\pi\Lambda^*} e^{-2S(x-a)/h} (1 + \mathcal{O}(e^{-2S(b-\beta)/h})) \quad (10.3.2)$$

$$\frac{|\psi_-(-\sqrt{\lambda+B}, x)|^2}{4\pi\sqrt{\lambda+B}} = \frac{\sqrt{\lambda}}{\pi(\Lambda^* + B)} e^{2S(x-b)/h} (1 + \mathcal{O}(e^{-2S(a-\alpha)/h})), \quad (10.3.3)$$

On applique ensuite le théorème de Mercer 9.10 p.99 pour évaluer la trace, qui

donne :

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}[F(H|_I(h))\varphi] &= \int_a^b K[x, x] dx \\
 &= \int_a^b \int_0^{\Lambda^*} \frac{|\psi_-(\sqrt{\lambda}, x)|^2}{4\pi h \sqrt{\lambda}} + \frac{|\psi_-(-\sqrt{\lambda+B}, x)|^2}{4\pi h \sqrt{\lambda+B}} F(\lambda) \varphi(x) d\lambda dx \\
 &\quad + \int_a^b \int_{-B}^0 \frac{|\psi_-(-\sqrt{\lambda+B}, x)|^2}{4\pi h \sqrt{\lambda+B}} F(\lambda) \varphi(x) d\lambda dx. \tag{10.3.4}
 \end{aligned}$$

Ensuite, avec Fubini, et pour φ supportée dans $[\alpha; \beta] \subset [a; b]$:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}[F(H|_I(h))\varphi] &\leq \int_0^{\Lambda^*} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{|\psi_-(\sqrt{\lambda}, x)|^2}{4\pi h \sqrt{\lambda}} + \frac{|\psi_-(-\sqrt{\lambda+B}, x)|^2}{4\pi h \sqrt{\lambda+B}} F(\lambda) \varphi(x) d\lambda dx \\
 &\quad + \int_{-B}^0 \int_{\alpha}^{\beta} \frac{|\psi_-(-\sqrt{\lambda+B}, x)|^2}{4\pi h \sqrt{\lambda+B}} F(\lambda) \varphi(x) d\lambda dx. \tag{10.3.5}
 \end{aligned}$$

Utilisant les expressions (10.3.2)-(10.3.3), on obtient que l'intégrale intérieure est bien, d'après la monotonie de la distance d'Agmon par rapport à l'énergie, majorée uniformément en λ par $\mathcal{O}(e^{-d_*(\partial I, \partial K)/h}) \|F\|_{\infty} \|\varphi\|_{\infty}$. En intégrant (10.3.5), on trouve le résultat. ■

10.4 Application au nombre de valeurs propres

On obtient de la proposition précédente une première estimation sur le nombre de valeurs propres pour le problème de Dirichlet sur un ouvert avec puits quantiques.

■ **10.13. Corollaire.** Soit $\Omega = \mathbb{R}$ ou Ω un segment contenant $[a; b]$, $(\tilde{v}^h)_{h>0}$ une famille de potentiels bornés dans $L^{\infty}(\Omega)$ et soit

$$\Lambda_0 := \inf_{h>0} \inf_{x \in \Omega} \tilde{v}^h(x).$$

Notons $\nu^h = \tilde{v}^h - W^h$, et soit A_{ν^h} la réalisation de Dirichlet sur Ω de l'opérateur

$$-h^2 d^2/dx^2 + \tilde{v}^h(x).$$

Enfin pour tout $\Lambda \in \mathbb{R}$, désignons $N(\Lambda)$ le nombre de valeurs propres de A_{ν^h} inférieures à Λ :

$$N(\Lambda) := \#\{\lambda \in \sigma(A_{\nu^h}) \mid \lambda \leq \Lambda\}.$$

Alors pour tout $\Lambda < \Lambda_0$, on a

$$N(\Lambda) = \mathcal{O}(1), \quad h \rightarrow 0.$$

Preuve. Il suffit de calculer le rang du projecteur spectral

$$\mathbb{1}_{(-\infty; \Lambda]}(A_{\nu^h}) = \mathbb{1}_{(-\infty; \Lambda]}(A_{\nu^h}) \cdot \mathbb{1}_{\Omega}(x)$$

de l'opérateur A_{ν^h} sur l'ensemble $(-\infty; \Lambda]$, puisque le spectre de A_{ν^h} est discret et constitué de valeurs propres. Noter que le spectre de A_{ν^h} est par hypothèse sur ν^h borné inférieurement par

$$\Lambda_- := \Lambda_0 - |W^h|_{\infty}.$$

Comme le rang du projecteur est donné par sa trace, on a :

$$N(\Lambda) = \text{Tr}(\mathbb{1}_{(-\infty; \Lambda]}(A_{\nu^h})) = \text{Tr}(\mathbb{1}_{[\Lambda_-; \Lambda]}(A_{\nu^h})).$$

Soit ensuite θ une fonction lisse positive à support compact valant 1 sur $[\Lambda_-; \Lambda]$.

On a

$$\mathbb{1}_{[\Lambda_-; \Lambda]}(\lambda) \leq \theta(\lambda), \quad \forall \lambda \in \mathbb{R},$$

d'où par le calcul fonctionnel :

$$\mathbb{1}_{[\Lambda_-; \Lambda]}(A_{\nu^h}) \leq \theta(A_{\nu^h})$$

puis en conjuguant par le projecteur orthogonal $\mathbb{1}_{\Omega}$

$$\mathbb{1}_{\Omega}^* \mathbb{1}_{[\Lambda_-; \Lambda]}(A_{\nu^h}) \mathbb{1}_{\Omega} \leq \mathbb{1}_{\Omega}^* \theta(A_{\nu^h}) \mathbb{1}_{\Omega}.$$

Chacun de ces deux opérateurs est à trace. Le premier clairement, puisqu'il est de rang fini. Quant au second, cela découle de la proposition 10.4. Enfin en prenant la trace, et utilisant sa cyclicité, on obtient

$$N(\Lambda) \leq \text{Tr}(\theta(A_{\nu^h}) \mathbb{1}_{\Omega}) = \int_{\Omega} dn_{\theta}[A_{\nu^h}].$$

On conclut en utilisant la proposition 10.11, ce qui donne

$$\text{Tr}(\theta(A_{\nu^h}) \mathbb{1}_{\Omega}) \leq \text{Tr}(\theta(A_{\tilde{\nu}^h}) \mathbb{1}_{\Omega}) + C,$$

et par choix de Λ et par hypothèse sur ν^h , $A_{\tilde{\nu}^h}$ n'a pas de spectre dans l'intervalle $(-\infty; \Lambda]$. ■

10.5 Principe de monotonie

Ici, on rappelle le résultat démontré dans [Ni2]. Il s'agit d'un principe de monotonie qui permet notamment de borner la famille de mesures.

■ **10.14. Proposition.** Soit $H_\infty(h)$ le hamiltonien de domaine $H^2(\mathbb{R})$ opérant par

$$H_\infty(h)u = -h^2 u'' + \mathcal{B}_\infty(\cdot - b)u.$$

Pour $i = 1, 2$, soit ν_i deux potentiels $L^\infty([a; b])$ et $H_i := H_\infty(h) + \nu_i$. Fixons une fonction $F \in C^\infty$ positive, à décroissance rapide en $+\infty$, et supposons de plus que F est décroissante pour $t \in [0; 1]$ sur le spectre de $\sigma(tH_1 + (1-t)H_2)$. Alors on a :

$$\int_{[a; b]} (\nu_2 - \nu_1) dn_F[H_2] \leq \int_{[a; b]} (\nu_2 - \nu_1) dn_F[H_1],$$

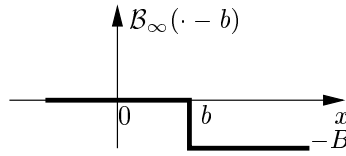


Figure 10.2. Potentiel pour le hamiltonien $H_\infty(h)$.

10.15. Remarque.

1. Cette propriété de convexité traduit que le nombre de particules décroît lorsque le potentiel augmente.
2. Par choix de H_i les hypothèses de [Ni2] sont bien vérifiées.
3. Noter que pour tout $t \in [0; 1]$, et $h > 0$, on a, d'après le corollaire 4.10 p. 55

$$\sigma(tH_1 + (1-t)H_2) = \sigma_{\text{ess}}(tH_1 + (1-t)H_2) = \sigma_{\text{ac}}(tH_1 + (1-t)H_2) = [-B, \infty).$$

4. Signalons enfin que ce principe de monotonie fournit un résultat global, en ce sens qu'il donne un contrôle de la masse totale des mesures. En particulier, on n'obtient par ce principe aucun renseignement sur le support des mesures.

■ **10.16. Corollaire.** Soit $(\nu^h)_{h>0}$ une famille de potentiels uniformément, bornés dans $L^\infty(I)$, et posons

$$\tilde{\nu}^h := \nu^h + W^h.$$

supposons que l'on ait :

$$\inf_{h>0} \inf_{x \in I} \tilde{\nu}^h(x) =: \Lambda_0 > 0.$$

Considérons le hamiltonien défini sur $H^2(\mathbb{R})$ par

$$H_{\nu^h} := H_\infty(h) + \nu^h.$$

Alors pour toute fonction θ lisse positive à support compact dans $] -B; \Lambda_0[$, la famille de mesures finies $(dn_\theta[H_{\nu^h}])_{h>0}$ est uniformément bornée par rapport à $h > 0$. On a la même conclusion pour la famille de mesures $(dn_\theta[H_{\tilde{\nu}^h}])_{h>0}$.

Preuve. D'après la proposition 10.11 dont les hypothèses sont vérifiées, il suffit de prouver la dernière partie de la proposition. Comme la fonction θ est à support compact, on peut trouver une fonction à support compact F positive et décroissante sur $[-B; \infty)$ telle que

$$\forall \lambda \in [-B; \infty), \quad \theta(\lambda) \leq F(\lambda).$$

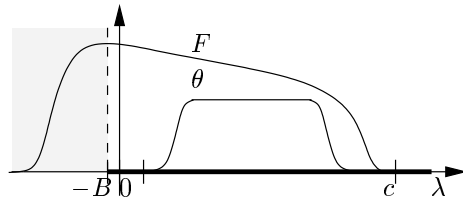


Figure 10.3. Fonctions θ et F .

Par suite on a d'après le calcul fonctionnel :

$$\theta(H_{\tilde{\nu}^h}) \leq F(H_{\tilde{\nu}^h}), \quad (10.5.1)$$

puis en conjuguant par $\mathbb{1}_{[a;b]}$:

$$\mathbb{1}_{[a;b]}^* [\theta(H_{\tilde{\nu}^h}) \mathbb{1}_{[a;b]}] \leq \mathbb{1}_{[a;b]}^* [F(H_{\tilde{\nu}^h}) \mathbb{1}_{[a;b]}].$$

En utilisant le fait que les opérateurs entre crochets sont à trace (proposition 10.4), ainsi que la cyclicité de la trace, il vient

$$\begin{aligned} 0 \leq \text{Tr} [\theta(H_{\tilde{\nu}^h}) \mathbb{1}_{[a;b]}] &\leq \text{Tr} [F(H_{\tilde{\nu}^h}) \mathbb{1}_{[a;b]}] \\ 0 \leq \int_{[a;b]} dn_\theta[H_{\tilde{\nu}^h}] &\leq \int_{[a;b]} dn_F[H_{\tilde{\nu}^h}]. \end{aligned} \quad (10.5.2)$$

On veut ensuite borner le membre de droite de (10.5.2) en appliquant le principe de monotonie : Fixons pour cela $\Lambda_- > 0$ tel que $\Lambda_- < \Lambda_0$, et introduisons H_{Λ_-} le hamiltonien sur $H^2(\mathbb{R})$ défini par

$$H_{\Lambda_-} := H_\infty(h) + \Lambda_- \mathbb{1}_I.$$

Écrivons alors

$$H_{\tilde{\nu}^h} - H_{\Lambda_-} = \tilde{\nu}^h - \Lambda_- \mathbb{1}_I =: \delta V,$$

et par hypothèse, on a donc

$$0 < \Lambda_0 - \Lambda_- \leq \delta V(x) \leq \tilde{\nu}^h(x) \leq \sup_{h>0} |\tilde{\nu}^h|_\infty =: C_0 < +\infty. \quad (10.5.3)$$

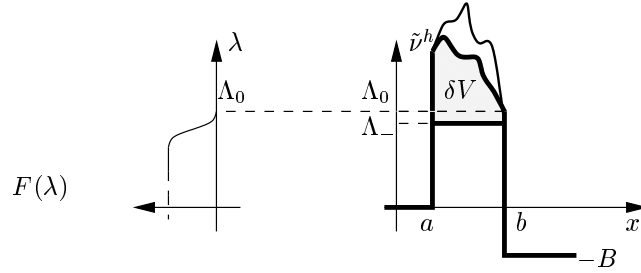


Figure 10.4. Principe de monotonie : $\tilde{\nu}^h \geq \Lambda_0 > \Lambda_- > 0$.

On applique alors le principe de monotonie (la proposition 10.5) avec $\nu_2 = \tilde{\nu}^h$, et $\nu_1 = \Lambda_- \mathbb{1}_I$, ce qui donne

$$0 \leq \int_{[a;b]} \delta V dn_F[H_{\tilde{\nu}^h}] \leq \int_{[a;b]} \delta V dn_F[H_{\Lambda_-}],$$

puis avec (10.5.3)

$$0 \leq (\Lambda_0 - \Lambda_-) \cdot \int_{[a;b]} dn_F[H_{\tilde{\nu}^h}] \leq C_0 \cdot \int_{[a;b]} dn_F[H_{\Lambda_-}],$$

et enfin avec (10.5.2)

$$0 \leq (\Lambda_0 - \Lambda_-) \cdot \text{Tr}[\theta(H_{\tilde{\nu}^h}) \mathbb{1}_{[a;b]}] \leq C_0 \cdot \text{Tr}[F(H_{\Lambda_-}) \mathbb{1}_{[a;b]}]$$

La trace de l'opérateur dans le membre de droite de l'inégalité ci-dessus a été calculée : elle est bien bornée par rapport à $h > 0$ d'après la proposition 10.12 p.106. ■

10.6 Application au problème linéaire du puits dans l'île.

On rappelle que $H(h) = H_\infty(h) + \mathcal{V}^h$, $\mathcal{V}^h = \tilde{V}_0 - W^h + V_{NL}^h$, avec les notations et hypothèses (1.1.1)-(1.1.12).

Les résultats qui suivent sont des corollaires issus de la section précédente.

■ **10.17. Proposition.** Soit (V_{NL}^h) une famille bornée dans $L^\infty(I)$ de potentiels positifs et $\theta \in C_c^\infty(\Lambda_*; \Lambda^*)$ positive. Alors l'application

$$C_0^c[a; b] \ni \varphi \mapsto \text{Tr}[\theta(H(h))\varphi]$$

définit une mesure positive bornée sur $[a; b]$. De plus la famille de mesures $\{dn_\theta[H(h)]\}_{h>0}$ est uniformément bornée.

Preuve. La bien définition de $dn_\theta[H(h)]$ découle du corollaire 10.6 appliqué avec $\nu^h = V^h + \mathcal{B}$. Le caractère borné de la famille de mesures découle du corollaire 10.16 appliqué avec $\tilde{\nu}^h = \tilde{V}^h$. ■

10.7 Application au système Schrödinger-Poisson

Le problème a été défini dans le chapitre 2. Ici

$$H(h) = H_\infty(h) + \tilde{V}_{\text{int}} + \mathcal{B}_0 - W^h + V_{NL}^h, \quad V_{NL}^h = V[\rho^h],$$

$V[\rho^h]$ satisfaisant l'équation de Poisson

$$-\Delta V[\rho^h] = dn[\rho^h], \quad V[\rho^h](a) = V[\rho^h](b) = 0. \quad (10.7.1)$$

Il est alors facile de prouver les résultats suivants :

■ **10.18. Proposition.** Considérons le problème non-linéaire donné par (2.1.1) et (2.1.5), p.25. Alors, pour $h > 0$ assez petit, la famille de potentiels $\{V[\rho^h]\}_{h>0}$ est bornée dans L^∞ .

Preuve. Introduisons la notation suivante, qui sera commode dans la preuve : pour un potentiel $\nu \in L^\infty([a; b])$ on définit le hamiltonien $H[\nu]$ sur son domaine $H^2(\mathbb{R})$ par

$$H[\nu] = H_{\text{réf}}(h) + \tilde{V}_{\text{int}} - W^h + \nu, \quad \text{et} \quad H_{\text{réf}}(h) = H_\infty(h) + \mathcal{B}_0.$$

(la définition de $H_\infty(h)$ est rappelée dans la proposition 10.5, ou cf. figure 10.2) et on notera $dn_\theta[\nu]$ la densité de particules (def 17.1.1) définie par l'observable $\theta(H[\nu])$ (qui a un sens d'après le corollaire 10.6).

Notons ensuite que d'après l'expression (2.1.4) p. 27 de la distribution $n[\rho^h]$, c'est une fonction L^1 , si bien qu'avec l'équation de Poisson, $V[\rho^h]$ est H_0^1 , et par suite, (10.7.1) se réécrit après multiplication par $V[\rho^h]$ et intégration par parties :

$$\frac{1}{2} \int_a^b V[\rho^h]^2 dx = \int_a^b V[\rho^h] n[\rho^h] dx. \quad (10.7.2)$$

Par hypothèse 2.3 p.26 sur la fonction g , on peut trouver une fonction θ lisse positive à support compact dans $[\Lambda_*; \Lambda^*[$ et décroissante sur $[-B; \infty)$ telle que l'on ait :

$$0 \leq g(k) \leq \theta(\lambda(k)), \quad \forall k \in \mathbb{R}^*, \quad \lambda(k) \neq 0. \quad (10.7.3)$$

Comme $V[\rho^h]$ est positive, en utilisant (10.7.3), il suit de la définition 2.6 p.27 de $n[\rho^h]$, et de la définition 17.1.1 de $n_\theta[V_{NL}^h]$ que :

$$\int_a^b V[\rho^h] n[\rho^h] dx \leq \int_a^b V[\rho^h] n_\theta[V_{NL}^h] dx. \quad (10.7.4)$$

On montre alors que la famille de mesures $\{n_\theta[V_{NL}^h]\}_{h>0}$ est bornée. Pour cela, appliquons la proposition 10.5 avec

$$\nu_2 := \mathcal{B}_I + \tilde{V}_0 - W^h + V[\rho^h] \quad \text{et} \quad \nu_1 = \mathcal{B}_I + \tilde{V}_0 - W^h.$$

On obtient, puisque $\nu_2 - \nu_1 = V[\rho^h]$

$$\int_a^b V[\rho^h] n_\theta[V_{NL}^h] dx \leq \int_a^b V[\rho^h] n_\theta[0] dx \quad (10.7.5)$$

$$\leq \int_{[a;b]} n_\theta[0] dx \cdot \|V[\rho^h]\|_\infty \quad (10.7.6)$$

Par définition de ν_1 , $\nu_1 = \mathcal{B}_I + \tilde{V}_0 - W^h$, si bien que :

$$\sup_{h>0} |\nu_1| \leq \|\tilde{V}_0\|_\infty < +\infty \quad \text{et} \quad \inf_{h>0} |\tilde{\nu}_1| \geq \Lambda_0, \quad (10.7.7)$$

on déduit du corollaire 10.16 appliqué avec $\nu^h = \nu_1$, $\lambda_- = \Lambda_0$, θ étant supportée dans $]\Lambda_*; \Lambda^*[$:

$$\sup_{h>0} \|n_\theta[\nu_1]\|_m =: C < \infty, \quad (10.7.8)$$

et mettant bout à bout (10.7.2), (10.7.4), (10.7.6), et (10.7.8), on obtient :

$$\frac{1}{2} \int_a^b (\partial_x V[\rho^h])^2 dx \leq C \cdot \|V[\rho^h]\|_\infty \leq C' \cdot \|V[\rho^h]\|_{H_0^1} \quad (10.7.9)$$

la dernière inégalité découlant de l'injection de Sobolev $H^1 \subset L^\infty$ et de l'inégalité de Poincaré. On conclut en remarquant que le premier terme de la chaîne se récrit $1/2 \|V[\rho^h]\|_{H_0^1}^2$. ■

■ **10.19. Corollaire.** *La famille de mesures $\{dn[\rho^h]\}_{h>0}$ est bornée dans $\mathcal{M}_b(I)$.*

Preuve. Comme la famille de potentiels $\{V[\rho^h]\}$ est bornée dans L^∞ , on peut appliquer le corollaire 10.16 à $H(h)$. La famille de mesures $\{dn[H(h)]\}$ est donc bornée, et avec (10.7.3), il en est de même pour la famille de mesures $\{dn[\rho^h]\}_{h>0}$. Cela démontre le résultat. ■

■ **10.20. Corollaire.** *La famille de potentiels $\{V[\rho^h]\}_{h>0}$ est bornée dans $BV_0^2(I)$. En particulier, pour tout $\alpha > 0$, c'est une famille relativement compacte dans $C^{0,\alpha}(I)$.*

Preuve. C'est une conséquence du corollaire précédent et de l'équation de Laplace (2.1.5) p.28 vérifiée par $V[\rho^h]$. ■

Partie IV

Analyse du problème de Dirichlet

Décroissance des fonctions propres

On montre dans ce chapitre une première estimation des états de Dirichlet pour le problème du puits dans l'île. Essentiellement, les fonctions propres se concentrent dans les puits quantiques. Cela concorde bien avec l'image de la mécanique classique : la probabilité de présence de la particule représentée par la fonction propre dans les régions classiquement interdite est exponentiellement petite quand le paramètre h tend vers zéro.

Dans tout ce chapitre, Ω désigne un intervalle ouvert (non vide) contenu dans l'île $I = [a; b]$, et $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ une famille de fonctions dans $W^{1,\infty}(\Omega)$.

11.1 Fonctions propres du problème de Dirichlet

■ **11.1. Notation.** On notera $H_D^\Omega(h) \equiv H_D^\Omega$ la réalisation de Dirichlet sur Ω de l'opérateur

$$P(h) := -h d^2/dx^2 + \tilde{\mathcal{V}}^h - W^h.$$

$$D(H_D(h)) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega), \quad \forall u \in D(H_D(h)), \quad H_D(h)u := P(h)u.$$

Rappelons que du point de vue spectral, ce hamiltonien se diagonalise en base orthonormée, et que le spectre consiste en une suite de valeurs propres simples qui tend vers $+\infty$.

■ **11.2. Hypothèse.** on suppose que la famille de fonctions $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ est dans $L^\infty(\Omega)$ et on suppose en outre que :

$$\inf_{h>0} \inf_{x \in \Omega} \tilde{\mathcal{V}}^h(x) \geq \Lambda_0 > 0. \quad (11.1.1)$$

ainsi, la famille de potentiels est uniformément minorée.

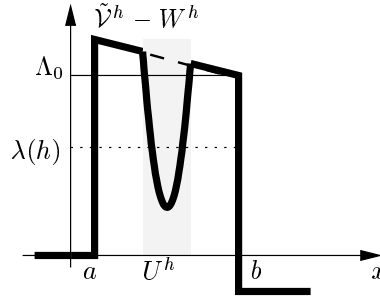


Figure 11.1. Potentiels \tilde{V}^h (en pointillés) et $\tilde{V}^h - W^h$.

■ **11.3. Notation.** Pour $h > 0$, soit $\lambda(h) < \Lambda_0$ une valeur propre de $H_D^\Omega(h)$ dans $\mathcal{I}(\varepsilon_0)$, et $\phi(h)$ un vecteur propre unitaire associé $\lambda(h)$

$$H_D(h)\phi(h) = \lambda(h)\phi(h), \quad \|\phi(h)\|_{L^2} = 1.$$

On a alors les résultats de localisation suivants :

■ **11.4. Théorème.** Fixons $\Lambda^* < \Lambda_0$, et soit $\lambda(h) \leq \Lambda^*$ une valeur propre de $H_D^\Omega(h)$, $\phi(h)$ un vecteur unitaire de associé. Posons

$$\forall h > 0, \quad \alpha(h) := \Lambda_0 - \lambda(h) > 0.$$

Alors, il existe une constante $M > 0$ telle que pour tout $\varepsilon > 0$ assez petit, on a les résultats suivants :

i) Pour tout $h > 0$ assez petit, on a l'estimation a priori suivante

$$|(he^{(1-\varepsilon)d(\cdot, U^h)/h}\phi(h))'|_{L^2}^2 + |e^{(1-\varepsilon)d(\cdot, U^h)/h}\phi(h)|_{L^2}^2 \leq 2w_\infty \frac{e^{2M}}{\varepsilon\alpha(h)},$$

où d désigne la distance d'Agmon au puits pour le potentiel égal à $\tilde{V}^h - W^h$, à l'énergie $\lambda(h)$.

ii) Si en outre $\lambda(h)$ converge vers un réel $\lambda(0)$ alors i) a encore lieu en remplaçant $\lambda(h)$ par $\lambda(0)$.

11.5. Remarque. Rappelons que $W^h = \sum w_i((\cdot - c_i)/h)$, et que $w_\infty = \max_i \|w_i\|_\infty$.

Preuve. La preuve originale est dans [He]. Néanmoins, dans notre situation quantique, celle-ci est assez directe. On se contentera de prouver le point *i*) qui reprend les mêmes idées : la preuve consiste d'abord à appliquer l'identité du lemme 8.1 p.87 avec $V = \tilde{\mathcal{V}}^h - W^h$, $z = \lambda(h)$ et $u_1 = u_2 = \phi(h)$, ce qui donne

$$0 = \int_I |he^{\varphi/h} \phi(h)'|^2 dx + \int_I (V - \lambda(h) - \varphi'^2) |e^{\varphi/h} \phi(h)|^2 dx, \quad (11.1.2)$$

puis à considérer pour $\varepsilon > 0$ assez petit la fonction continue C^1 par morceaux φ :

$$\varphi(x) := (1 - \varepsilon)d(x, U^h) \equiv (1 - \varepsilon) \inf_{c \in U^h} d(x, c),$$

dont la dérivée vérifie

$$\varphi'^2 = (1 - \varepsilon)^2 (V^h - \lambda(h))_+.$$

On remarque ensuite qu'en dehors de U^h on a $W^h \equiv 0$, et donc pour $x \in I - U^h$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}^h(x) - \lambda(h) - \varphi'^2(x) &= \tilde{\mathcal{V}}^h(x) - \lambda(h) - (1 - \varepsilon)^2 (\tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(h))_+ \\ &= \varepsilon(2 - \varepsilon)(\tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(h)) \end{aligned} \quad (11.1.3)$$

$$\geq \varepsilon(\Lambda_0 - \lambda(h)) > 0, \quad (11.1.4)$$

ceci pour ε et h assez petits, tandis que pour $x \in U^h$ on a la minoration :

$$\begin{aligned} \mathcal{V}^h - \lambda(h) - \varphi'^2(x) &= \tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(h) - W^h - (1 - \varepsilon)^2 (\tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(h) - W^h)_+ \\ &\geq \tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(h) - W^h - (1 - \varepsilon)^2 |\tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(h) - W^h| \\ &\geq (1 - (1 - \varepsilon)^2) [\tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(h)] - |w|_\infty - (1 - \varepsilon)^2 |w|_\infty \\ &\geq -2w_\infty + \varepsilon(\Lambda_0 - \lambda(h)) = -2w_\infty + \varepsilon\alpha(h). \end{aligned}$$

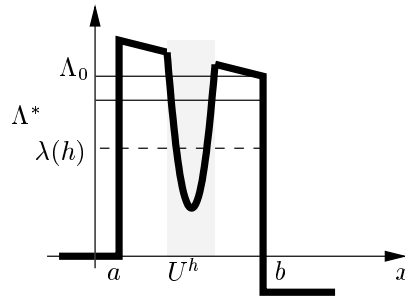


Figure 11.2. $\phi(h)$ ne peut être grande en dehors de la région elliptique $I - U^h$.

Ainsi (11.1.2) donne avec les minoration précédentes,

$$\int_I |he^{\varphi/h} \phi'(h)|^2 dx + \varepsilon\alpha(h) \int_{I - U^h} |e^{\varphi/h} \phi(h)|^2 dx \leq - \int_{U^h} (\mathcal{V} - \lambda(h) - \varphi'^2) |e^{\varphi/h} \phi(h)|^2 dx$$

puis

$$\begin{aligned} \int_I |he^{\varphi/h} \phi'(h)|^2 dx + \varepsilon \alpha(h) \int_I |e^{\varphi/h} \phi(h)|^2 dx &\leq 2|w|_\infty \sup_{U^h} e^{2\varphi/h} \int_{U^h} |\phi(h)|^2 dx \\ &\leq 2w_\infty \sup_{U^h} e^{2\varphi/h} \cdot 1, \end{aligned}$$

la dernière inégalité parce que $\phi(h)$ est normalisée. Ensuite on utilise que pour tout point x dans U^h , x est dans un h -voisinage d'un c_j . Comme $\varphi(c_j) = 0$, en écrivant $\varphi(x) = \varphi(c_j) + (\varphi(x) - \varphi(c_j))$ et en utilisant le caractère M -lipschitzien de φ (la constante M pouvant être prise indépendante de $h > 0$ puisque le potentiel est uniformément borné), on trouve

$$\int_I |he^{\varphi/h} \phi'_n(h)|^2 dx + \varepsilon \alpha(h) \int_I |e^{\varphi/h} \phi_n(h)|^2 dx \leq (2w_\infty + 1)e^{2M},$$

et il est aisé ensuite de conclure. ■

Avec les injections de Sobolev on tire des estimations ponctuelles des fonctions propres. Par régularité elliptique, on tire également des estimations ponctuelles de la dérivée. Ainsi :

■ 11.6. Corollaire. *Pour tout $\varepsilon > 0$, il existe une constante $C_\varepsilon > 0$ telle que pour tout $\lambda(h) \leq \Lambda^*$ et $\phi(h)$ vecteur propre normalisé associé on a la majoration ponctuelle suivante :*

$$\forall x \in [a; b], \quad |\phi(h)(x)| \leq C_\varepsilon e^{-(d(x, U^h) - \varepsilon)/h}.$$

En outre, l'estimation s'applique également à la dérivée $\phi(h)$.

11.2 Estimations uniformes par rapport au potentiel

L'estimation du corollaire fait intervenir le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h$ et la valeur propre $\lambda(h)$. Toutefois, puisque les N puits sont de diamètre $2h$, et que $\tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(h) \geq \alpha(h)$, on voit, en revenant à la définition de la distance d'Agmon que l'on a la minoration suivante :

$$\forall x, y \in \Omega, \quad d(x, y) \geq \alpha(h)^{1/2} |x - y| - Nh\alpha(h)^{1/2},$$

de laquelle on obtient

$$\forall x, y \in \Omega, \quad e^{-d(x, y)/h} \leq Ce^{-c_0|x-y|/h}, \quad h \rightarrow 0, \quad (11.2.1)$$

la constante C ne dépendant pas de h et où $c_0 = (\Lambda_0 - \Lambda^*)^{1/2}$. Le corollaire précédent fournit les deux résultats suivants :

■ **11.7. Corollaire.** *Il existe une constante $C_\varepsilon > 0$ telle que pour tout $h > 0$ assez petit on ait*

$$\forall x \in \Omega, \quad |\phi(h)(x)| \leq C_\varepsilon e^{\varepsilon/h} \min_{i=1 \dots N} e^{-c_0|x-c_i|/h},$$

où $c_0 = (\Lambda_0 - \Lambda^*)^{1/2}$.

■ **11.8. Corollaire.** *À extraction près, la famille de densités $\{|\phi(h)|^2 dx\}_{h>0}$ converge faiblement vers une mesure atomique chargeant les puits :*

$$|\phi(h)|^2 dx \xrightarrow{h \rightarrow 0} \sum_{j=1}^N \alpha_j \delta_{x=c_j},$$

Les α_j sont des réels satisfaisant de plus

$$\forall j, \quad \alpha_j \geq 0 \quad \text{et} \quad \sum_{j=1}^N \alpha_j = 1.$$

Autrement dit la limite faible est une combinaison convexe de masses de Dirac sur les puits ponctuels.

11.9. Remarque.

1. Ainsi les fonctions propres se concentrent exponentiellement dans les régions classiquement accessibles.
2. Dans le cas où la valeur propre $\lambda(h)$ a une limite, on a une estimation du même type avec le point *ii*) du théorème.
3. La fonction propre est *a priori* délocalisée dans les N puits, ce qui explique la présence des coefficients α_j . Ces coefficients sont *a priori* indéterminés. Cet aspect sera développé dans le chapitre 13.

Dans la suite du texte, on sera souvent amené à faire des estimations à un préfacteur $e^{c\eta/h}$ près, la constante c ne dépendant pas de η . C'est pourquoi on introduit la

■ **11.10. Définition.** *Soit $f(h)$, et $g(h)$ deux fonctions positives ou nulles. Pour le paramètre $\eta \in]0; \eta_0[$, η_0 donné, on écrira*

$$f(h) \lesssim_\eta g(h)$$

si il existe une constante $c > 0$ telle que

$$\forall \eta \in]0; \eta_0[, \quad \exists C_\eta > 0, \quad \text{t.q.} \quad f(h) \leq C_\eta e^{c\eta/h} g(h) \quad h \rightarrow 0.$$

On écrira parfois

$$f(h) = \tilde{O}(g(h))$$

si pour tout $\eta > 0$ assez petit on a $f(h) \lesssim_\eta g(h)$.

11.11. Remarque. Ainsi d'après le corollaire 11.6 on a

$$\phi(h) = \tilde{O}(e^{-d(\cdot, U^h)/h}).$$

On verra dans l'étude détaillé du problème multi-puits (proposition 13.14 p.144) que l'on peut préciser les puits dans lesquels la fraction de $\phi(h)$ présente est significative quand $h \rightarrow 0$.

Étude du problème à un puits

Dans ce chapitre, on aborde deux aspects sur le problème de Dirichlet du puits dans l'île : le premier est purement spectral. On calcule les positions limites des valeurs propres du problème de Dirichlet sous l'hypothèse que la famille de potentiels $\tilde{\mathcal{V}}^h$ est bornée dans $W^{1,\infty}$ et converge dans C^0 . On définit pour cela la notion d'énergie asymptotiquement résonante. Celles-ci s'expriment à l'aide des valeurs à la limite du potentiel dans le puits quantique, et déterminent la position limite du spectre. Le second aspect est géométrique : on donne des estimations ponctuelles du noyau de la résolvante, obtenues essentiellement par des méthodes d'énergie.

Dans tout ce chapitre, Ω désigne un intervalle ouvert (non vide) contenu dans l'île $I = [a; b]$, et $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ une famille de fonctions dans $W^{1,\infty}(\Omega)$. Ici, le nombre de puits est fixé à $N = 1$ et on notera $c = c_1$.

12.1 Hypothèses

■ **12.1. Notation.** On notera $H_D^\Omega(h) \equiv H_D^\Omega$ la réalisation de Dirichlet sur Ω de l'opérateur

$$P(h) := -h d^2/dx^2 + \tilde{\mathcal{V}}^h - W^h.$$

$$D(H_D^\Omega(h)) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega), \quad \forall u \in D(H_D(h)), \quad H_D^\Omega(h)u := P(h)u.$$

■ **12.2. Hypothèse.** *on suppose que la famille de fonctions $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ est dans $W^{1,\infty}(\Omega)$, et uniformément bornée dans $W^{1,\infty}(\Omega)$. On suppose en outre que :*

$$\inf_{h>0} \inf_{x \in \Omega} \tilde{\mathcal{V}}^h(x) \geq \Lambda_0 > 0, \quad (12.1.1)$$

Et que la famille $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ converge dans $C^0(\Omega)$. Notons $\tilde{\mathcal{V}}^0$ la limite :

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|\tilde{\mathcal{V}}^h - \tilde{\mathcal{V}}^0\|_{\infty} = 0. \quad (12.1.2)$$

On se restreint ensuite à un domaine d'énergie compact :

■ **12.3. Hypothèse.** *On fixe un segment $[\Lambda_*, \Lambda^*] \subset (-\infty; \Lambda_0]$ et on étudiera pour tout $h > 0$ l'ensemble :*

$$\sigma(H_D^\Omega(h)) \cap [\Lambda_*, \Lambda^*].$$

12.2 La stratégie

La stratégie est fondée sur les remarques assez simples suivantes :

1. Contrairement à une situation purement semi-classique où les valeurs propres peuvent se concentrer dans un ensemble de taille $\mathcal{O}(h)$, (voir [He], ou [HeSj2]), la présence d'un puits quantique se concentrant avec un taux $\sim h$ doit bien séparer le spectre. En effet, l'opérateur $-h^2 d^2/dx^2 - w(x/h)$ est unitairement équivalent à l'opérateur $-d^2/dx^2 + w$ par

$$T(h) : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}), \quad u \mapsto h^{-1/2} u(\cdot/h), \quad (12.2.1)$$

et dont le spectre ne dépend pas de h .

2. L'ellipticité hors du puits suggère que si l'on modifie les valeurs du potentiel assez loin du puits, on perturbe assez peu le spectre de $H(h)$.
3. À l'échelle h à laquelle se concentre le puits de potentiel $w((\cdot - c)/h)$, vu du puits, le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h$ semble quasiment constant et égal à $\tilde{\mathcal{V}}^h(c_1)$. Ainsi, si l'on remplace le potentiel par ce potentiel constant, on devrait à la limite trouver les positions des valeurs propres.

Ce sont ces idées que l'on va mettre en place dans la suite après quelques rappels de théorie spectrale.

12.3 Spectre limite de Dirichlet. Énergies résonantes

Rappelons que par hypothèse on est dans le cas où il n'y a qu'un seul puits quantique :

$$W^h(x) = w \left(\frac{x-c}{h} \right), \quad w \in C_c^\infty([-1; 1]), \quad w \geq 0, \quad c \in \Omega.$$

Conformément au point 1. de la stratégie développée dans la section 12.2, on s'intéresse au spectre de l'opérateur dilaté sur \mathbb{R} dont le potentiel n'est constitué que d'un puits :

■ **12.4. Lemme.** Soit \hat{H}_0 le hamiltonien sur $L^2(\mathbb{R})$ de domaine $H^2(\mathbb{R})$ opérant par :

$$\hat{H}_0 u := -u'' - w(x)u,$$

et soit $\delta > 0$. Alors $\sigma(\hat{H}_0) \cap (-\infty; -\delta]$ est constitué d'un nombre fini de valeurs propres simples.

Preuve. Comme perturbation compacte du Laplacien libre, le spectre essentiel est \mathbb{R}_+ . Si $\lambda < -|w|_\infty$, alors λ n'est pas dans le spectre. Il suit que $\sigma(\hat{H}_0) \cap (-\infty; -\delta]$ est discret sans points d'accumulation : il est fini. Quant à la simplicité des valeurs propres, c'est encore un argument de dimension de l'espace des solutions de l'équation différentielle sous-jacente. ■

■ **12.5. Notation.**

On désignera par (e_k) la suite ordonnée (éventuellement finie) des valeurs propres négatives de \hat{H}_0 :

$$\sigma(\hat{H}_0) \cap (-\infty; 0[:= \{e_1 < e_2 < \dots < e_k < \dots\}, \quad k \in \mathbb{K} \subset \mathbb{N}^*.$$

Ces nombres e_k , connus *a priori* si le profil w est connu, permettent de définir des quantités asymptotiques essentielles dans la suite :

■ **12.6. Définition.** Notons pour tout $k \in \mathbb{K}$ entier

$$e_k^o := e_k + \tilde{\mathcal{V}}^0(c).$$

les valeurs propres e_k de \hat{H}_0 shiftées de la valeur du potentiel limite dans le puits. On notera

$$\mathcal{E}(H(h)) := \{e_k^o\}_{k \in \mathbb{K}}, \quad (12.3.1)$$

et on dira que e_k^o est une énergie asymptotiquement résonante (ou plus simplement énergie résonante) du Hamiltonien $H(h)$.

12.7. Remarque.

1. Noter que l'on a pour tout couple d'indices (k, k')

$$e_k^o - e_{k'}^o = e_k - e_{k'},$$

et que l'ensemble des énergies résonantes forme une suite strictement croissante.

2. Noter que l'ensemble $\mathcal{E}(H(h))$ peut s'interpréter comme le spectre discret du hamiltonien $\hat{H}_0 + \tilde{\mathcal{V}}^0(c) \cdot \mathbb{1}$.
3. Vu de cette manière, on constate que la notion d'énergie asymptotiquement résonante ne dépend que du potentiel limite et non pas du Hamiltonien $H_D^\Omega(h)$. En particulier, si Ω' est un autre ouvert contenant c , on obtient les mêmes énergies asymptotiquement résonantes, et la définition est consistante.

■ **12.8. Définition.** *On dira que le puits c est asymptotiquement résonant à l'énergie λ pour tout $\lambda \in \mathcal{E}(H(h))$. Si $\lambda \notin \mathcal{E}(H(h))$, on dira que le puits c n'est pas résonant à l'énergie λ . On dira enfin que le puits c est résonant si il est résonant pour au moins une énergie $\lambda \in \mathbb{R}$.*

On peut à présent établir le résultat annoncé au début du chapitre dans le cas d'un puits.

■ **12.9. Théorème.** *Soit $\Omega \subset]a; b[$ un ouvert contenant c et $H_D^\Omega(h)$ la réalisation de Dirichlet sur Ω de*

$$P(h) := -h^2 d^2/dx^2 + \tilde{\mathcal{V}}^h - W^h.$$

On suppose que la famille de potentiels $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ est bornée dans $W^{1,\infty}(\Omega)$ et converge dans C^0 vers une fonction $\tilde{\mathcal{V}}^0$. Soit $\lambda_0 := e_l^o$ une énergie résonante dans $[\Lambda_; \Lambda^*]$ et définissons :*

$$3\varepsilon_- := \lambda_0 - e_{l-1}^o > 0, \quad \text{et} \quad 3\varepsilon_+ := e_{l+1}^o - \lambda_0 > 0.$$

Alors pour $h > 0$ assez petit :

- i) $H_D^\Omega(h)$ possède une unique valeur propre $\lambda(h)$ dans l'intervalle $[\lambda_0 - \varepsilon_-; \lambda_0 + \varepsilon_+]$.
- ii) $H_D(h)$ ne possède pas de valeurs propres dans l'intervalle $]\lambda_0 - 2\varepsilon_-; \lambda_0 - \varepsilon_- \cup]\lambda_0 + \varepsilon_+; \lambda_0 + 2\varepsilon_+[$.
- iii) $(\lambda(h))_{h>0}$ converge et $\lim_{h \rightarrow 0} \lambda(h) = \lambda_0$.

12.10. Remarque.

1. Ainsi, les positions limites des valeurs propres sont bien les valeurs propres du problème pour le potentiel égal au puits seul ramené sur \mathbb{R} , et shiftées de la valeur limite du potentiel total avec puits bouché en $x = c$.
2. Si e_{k+1}^0 (resp. e_{k-1}^0) n'est pas défini, on peut prendre $\varepsilon_+ = \max\{1; \Lambda^* - e_k^0\}$ (resp. $\varepsilon_- = \max\{1; e_k^0 - \Lambda_*\}$).
3. Par choix de ε_{\pm} , l'ensemble des intervalles $[\lambda_0 - 2\varepsilon_-; \lambda_0 + 2\varepsilon_+]$, quand k décrit \mathbb{K} , est un recouvrement de $[\Lambda_*; \Lambda^*]$, si bien que l'on a entièrement identifié le spectre de $H_D(h)$ dans $[\Lambda_*; \Lambda^*]$.

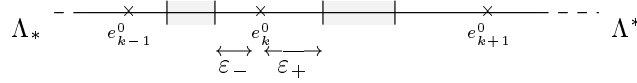


Figure 12.1. Par choix des intervalles autour de e_k^0 , on identifie dans un voisinage compact de $[\Lambda_*; \Lambda^*]$ le spectre de $H_D^\Omega(h)$.

Bien que les idées de la preuve, évoquées au début de la section, soient simples, celle-ci est un peu longue. Elle repose bien évidemment sur l'application du théorème 9.7.

Preuve.

1. **Notations.** Soit $\{\lambda_1(h), \dots, \lambda_{s(h)}(h)\}$ l'ensemble des valeurs propres de $H_D^\Omega(h)$ dans $[\lambda_0 - 2\varepsilon_-; \lambda_0 + 2\varepsilon_+]$. C'est un ensemble fini à $s(h)$ éléments, mais d'après le corollaire 10.13 p. 108 estimant le nombre de valeurs propres pour le problème du puits dans l'île, on obtient que $s(h)$ est uniformément borné

$$s(h) = \mathcal{O}(1) \quad h \rightarrow 0. \quad (12.3.2)$$

Considérons également une base orthonormée de vecteurs propres associée à $\{\lambda_1(h), \dots, \lambda_{s(h)}(h)\}$, soit $g_1(h), \dots, g_s(h)$. Soit ensuite $\varepsilon > 0$ et χ une fonction plateau C^∞ comme sur la figure 12.2, avec ε choisi de sorte que l'on ait

$$\varepsilon = \varepsilon(h), \quad \lim h^{-1}\varepsilon(h) = +\infty. \quad (12.3.3)$$

Dans la suite on choisira en effet ε dépendant de h . Remarquons que par choix de χ , les vecteurs χg_j vérifient d'après les résultats de décroissance des fonctions propres :

$$\langle \chi g_j(h), \chi g_{j'}(h) \rangle = \delta_{j,j'} + \mathcal{O}(e^{-c_0/h}). \quad (12.3.4)$$

Considérons à présent $\hat{H}(h)$ la réalisation auto-adjointe sur \mathbb{R} de l'opérateur :

$$\hat{P}(h) := -h^2 \frac{d^2}{dx^2} - w \left(\frac{x-c}{h} \right) + \tilde{\mathcal{V}}^h(c) \cdot \mathbb{1}. \quad (12.3.5)$$

Remarquer que *modulo* le puits w , le potentiel est constant.

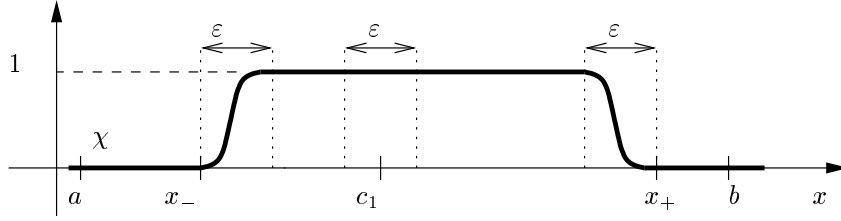


Figure 12.2. Fonction χ du lemme 12.9. sur cette figure, on a noté $\partial\Omega = \{x_-; x_+\}$

2. **Spectre de $\hat{H}(h)$ dans $[\lambda_0 - 2\varepsilon_-; \lambda_0 + 2\varepsilon_+]$.** Par définition de \hat{H}_0 , l'opérateur $\hat{H}(h)$ est unitairement équivalent à l'opérateur $\hat{H}_0 + \tilde{\mathcal{V}}^h(c) \cdot Id$. Son spectre se déduit de celui de \hat{H}_0 : par définition de e_k^0 en effet, pour $k \in \mathbb{K}$, les nombres

$$\mu_k(h) := e_k^0 + (\tilde{\mathcal{V}}^h(c) - \tilde{\mathcal{V}}^0(c))$$

sont les valeurs propres isolées (simples et classées par ordre croissant) de $\hat{H}(h)$. On veut établir qu'il y en a qu'une dans $[\lambda_0 - \varepsilon_-; \lambda_0 + \varepsilon_+]$.

Par hypothèse sur $\tilde{\mathcal{V}}^h$, on peut, quitte à réduire $h > 0$, supposer que

$$\|\tilde{\mathcal{V}}^h - \tilde{\mathcal{V}}^0\|_\infty < \varepsilon_0 := \min\{\varepsilon_-; \varepsilon_+\}. \quad (12.3.6)$$

Dans ce cas, d'après l'expression de $\mu_k(h)$ on a

$$\forall k \in \mathbb{K}, \quad |\mu_k(h) - e_k^0| < \varepsilon_0. \quad (12.3.7)$$

Or, par définition de λ_0 et de ε_0 , on a $\mu_l(h) \in [\lambda_0 - \varepsilon_-; \lambda_0 + \varepsilon_+]$ et

$$\mu_{l+1}(h) = \lambda_0 + 3\varepsilon_+ + (\tilde{\mathcal{V}}^h(c) - \tilde{\mathcal{V}}^0(c)) \geq \lambda_0 + 2\varepsilon_+, \quad (12.3.8)$$

et

$$\mu_{l-1}(h) = \lambda_0 - 3\varepsilon_- + (\tilde{\mathcal{V}}^h(c) - \tilde{\mathcal{V}}^0(c)) \leq \lambda_0 - 2\varepsilon_-. \quad (12.3.9)$$

Autrement dit :

$\forall h > 0$, h assez petit, $\hat{H}(h)$ possède exactement une valeur propre dans $\Lambda := [\lambda_0 - \varepsilon_-; \lambda_0 + \varepsilon_+]$, et

$$\sigma(\hat{H}(h)) \cap]\lambda_0 - 2\varepsilon_-; \lambda_0 - \varepsilon_-[\cup]\lambda_0 + \varepsilon_+; \lambda_0 + 2\varepsilon_+[= \emptyset. \quad (12.3.10)$$

3. Vecteurs propres approchés.

Remarquons maintenant que l'on a :

$$\hat{P}(h) = P(h) - \tilde{\mathcal{V}}^h(x) + \tilde{\mathcal{V}}^h(c) \cdot \mathbb{1}. \quad (12.3.11)$$

Comme pour tout $j = 1 \dots s(h)$ $\chi g_j(h)$ est dans le domaine de $\hat{H}(h)$, avec l'identité précédente, il vient

$$\begin{aligned}\hat{H}(h)\chi g_j(h) &= \hat{P}(h)\chi g_j(h) \\ &= \lambda_j(h)\chi g_j(h) + [P(h), \chi]g_j(h) + r_j(h)\end{aligned}\quad (12.3.12)$$

où

$$r_j(h) = \left(\tilde{\mathcal{V}}^h(c) - \tilde{\mathcal{V}}^h(x) \right) \chi g_j(h). \quad (12.3.13)$$

L'idée est alors d'utiliser les propriétés de décroissance des g_j loin du puits et le caractère borné de $\tilde{\mathcal{V}}^h$ dans $W^{1,\infty}$. Le corollaire 11.7 sur les estimations de décroissance uniformes par rapport au potentiel des fonctions propres du problème de Dirichlet, donne, pour tout j , avec par exemple, $\Lambda \in]\Lambda^* + \varepsilon_+; \Lambda_0[$, et en posant $\eta := \Lambda - (\Lambda^* + \varepsilon_+) > 0$:

$$\left| e^{\frac{\delta(\cdot, U^h)}{h}} h g_j'(h) \right|_{L^2}^2 + \left| e^{\frac{\delta(\cdot, U^h)}{h}} h g_j(h) \right|_{L^2}^2 \leq 2w_\infty \frac{4e^{2M}}{\eta}, \quad (12.3.14)$$

la constante M ne dépendant pas de h , et δ désignant la distance d'Agmon pour le potentiel égal à $\Lambda_0 - W^h$ à l'énergie Λ .

Comme les coefficients de $[P(h), \chi]$ sont supportés dans un ε -voisinage du bord de Ω , on déduit que

$$|[P(h), \chi]g_j(h)|_{L^2(\Omega)} \leq C e^{-\frac{1}{h}(\delta(\partial\Omega, c) - \varepsilon)}, \quad (12.3.15)$$

la constante C ne dépendant ni de h ni de ε . Explicitons cette majoration. Si l'on note

$$L_1 := \inf_{x \in \partial\Omega} |x - c|$$

la distance euclidienne du puits c au bord de Ω , alors (12.3.15) fournit la majoration, indépendante de $\tilde{\mathcal{V}}^h$, à savoir

$$|[P(h), \chi]g_j(h)|_{L^2(\Omega)} \leq C e^{-\eta(L_1 - \varepsilon)/h}, \quad (12.3.16)$$

la constante C ne dépendant ni de h ni de ε , ce qui finit d'estimer (12.3.15). Ensuite, on décompose $r_j(h)$ en

$$r_j(h) = (\mathbb{1}_{|x-c| \leq \varepsilon} + \mathbb{1}_{|x-c| > \varepsilon}) r_j(h). \quad (12.3.17)$$

En revenant à la définition (12.3.13) de r_j , et en utilisant le caractère lipschizien du potentiel, on voit que le premier terme de (12.3.17) se majore dans $L^2(\Omega)$ par

$$|\mathbb{1}_{|x-c| \leq \varepsilon} r_j(h)| \leq \varepsilon \sup_h \|\tilde{\mathcal{V}}^h\|_{W^{1,\infty}} |\chi g_j(h)|_{L^2(\Omega)} \leq C\varepsilon, \quad (12.3.18)$$

tandis que le second se majore à l'aide de (12.3.14) par

$$|\mathbb{I}_{|x-c|>\varepsilon} r_j(h)| \leq C' \exp[-\delta(c; \{|x-c| > \varepsilon\}/h)],$$

la constante C' ne dépendant ni de h ni de ε . Mais il est clair que par hypothèse sur ε , et par définition de la distance δ , on a $\delta(c; \{|x-c| > \varepsilon\}) \geq \eta(\varepsilon - h)$ et donc

$$\mathbb{I}_{|x-c|>\varepsilon} r_j(h) \leq C'' e^{-\eta\varepsilon/h}. \quad (12.3.19)$$

Lions alors les variables h et ε par :

$$\varepsilon := h^\alpha, \quad \alpha \in]0; 1[. \quad (12.3.20)$$

Dans ce cas pour $h > 0$ assez petit, (12.3.16) est $\mathcal{O}(e^{-c/h})$, (12.3.18) est $\mathcal{O}(h^\alpha)$, tandis que (12.3.19) est $\mathcal{O}(e^{-c/h^{1-\alpha}})$. Ainsi, (12.3.12) se récrit :

$$\hat{H}(h) \chi g_j(h) = \lambda_j(h) \chi g_j(h) + \rho_j(h) \quad (12.3.21)$$

où le terme résiduel $\rho_j(h)$ satisfait dans $L^2(\Omega)$ l'estimation

$$|\rho_j(h)|_{L^2(\Omega)} = \mathcal{O}(h^\alpha), \quad 0 < \alpha < 1. \quad (12.3.22)$$

4. Application du théorème 9.7. Appliquons ensuite le théorème 9.7 avec

$$A := \hat{H}(h), \quad [\Lambda_-; \Lambda_+] := [\lambda_0 - \varepsilon_-; \lambda_0 + \varepsilon_+], \quad a := \varepsilon_0 \equiv \min\{\varepsilon_+, \varepsilon_-\},$$

$$N := s(h), \quad \mu_j := \lambda_j(h) \in [\Lambda_-; \Lambda_+], \quad \psi_j := \chi g_j(h),$$

de sorte que les hypothèses sont vérifiées d'après (12.3.10) et (12.3.4). On obtient, en notant F le sous-espace spectral associé à $\hat{H}(h)$ sur $[\Lambda_-; \Lambda_+]$ et E le sous-espace engendré par les $\chi g_j(h)$:

$$\vec{d}(E; F) \leq \left(\frac{s(h)^{1/2}}{1 + o(1)} \right) \frac{\varepsilon}{a}, \quad (12.3.23)$$

Utilisant enfin la première majoration (12.3.2) de $s(h)$ et par choix (12.3.20) de ε , on obtient :

$$\vec{d}(E; F) \leq Ch^\alpha, \quad \forall \alpha \in]0; 1[, \quad (12.3.24)$$

d'où il suit d'après les propriétés de distance entre sous-espaces : quand $h \rightarrow 0$

$$s(h) \leq 1, \quad h \rightarrow 0 \quad (12.3.25)$$

5. Preuve de $s(h) \geq 1$ et de ii). Pour cela on applique encore le théorème 9.7 avec $A := H_D^\Omega(h)$, de la façon suivante :

on commence par remarquer que si ψ est un vecteur propre unitaire de \hat{H}_0 pour la valeur propre e_k la fonction

$$x \mapsto \psi(h)(x) := h^{-1/2} \psi\left(\frac{x}{h}\right),$$

est vecteur propre unitaire pour $\hat{H}(h)$ pour la valeur propre $\mu_k(h) = e_k^o + \tilde{\mathcal{V}}^h(c) - \tilde{\mathcal{V}}^0(c)$. Comme en dehors du support de w , la fonction ψ décroît exponentiellement, $\chi\psi(h)$ satisfait une inégalité du type (12.3.21) :

$$\hat{H}(h)\chi\psi(h) = \mu_k(h)\chi\psi(h) + \mathcal{O}(h^\alpha), \quad 0 < \alpha < 1, \quad (12.3.26)$$

l'égalité ayant lieu dans $L^2(\Omega)$, et α étant arbitraire. On applique le théorème de comparaison en prenant $N = 1$, $\psi_1 = \chi\psi(h)$, $\lambda_1 = \mu_k(h)$. Reste à choisir l'intervalle $[\Lambda_-; \Lambda_+]$.

Choix de l'intervalle $[\Lambda_-; \Lambda_+]$ et vérification de l'hypothèse (9.2.1). C'est un argument de décompte. Soit $0 < \varepsilon < \min\{\varepsilon_-, \varepsilon_+\}$ et supposons, puisque $\mu_k(h) = \lambda_0 + \tilde{\mathcal{V}}^h(c) - \tilde{\mathcal{V}}^0(c)$, que pour $h > 0$ assez petit on a

$$|\mu_k(h) - \lambda_0| < 2\varepsilon.$$

On pose pour $j \geq 1$ entier

$$L_h(j) :=]-jh^{\alpha/2}; -(j-1)h^{\alpha/2}] \cup [(j-1)h^{\alpha/2}; jh^{\alpha/2}[.$$

Noter que les ensembles $L_h(j)$ sont deux à deux disjoints. On considère ensuite l'intervalle

$$L(h) := [\lambda_0 - \varepsilon; \lambda_0 + \varepsilon] + \bigcup_{j=1}^2 L_h(j),$$

avec $h > 0$ assez petit de sorte que $L(h)$ soit contenu dans $[\lambda_0 - \varepsilon_-; \lambda_0 + \varepsilon_+]$ (figure 12.3). Comme $H_D^\Omega(h)$ possède au plus une valeur propre dans $[\lambda_0 - \varepsilon_-; \lambda_0 + \varepsilon_+]$, l'un des $L_h(j)$ ne contient pas de valeur propre de $H_D^\Omega(h)$. Ainsi, quitte à élargir $[\lambda_0 - \varepsilon; \lambda_0 + \varepsilon]$ de $h^{\alpha/2}$, on obtient un intervalle $[\Lambda_-; \Lambda_+]$ convenable, et dans un $h^{\alpha/2}$ -voisinage du bord de cet intervalle, $H_D^\Omega(h)$ n'a pas de valeurs propres. Cela permet de prendre $a(h) = h^{\alpha/2}$.

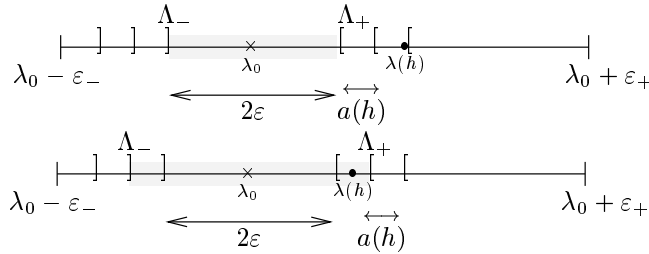


Figure 12.3. Choix de l'intervalle $[\Lambda_-; \Lambda_+]$. On peut prendre $a(h) = h^{\alpha/2}$.

Le théorème de comparaison 9.7 donne alors, en notant E le sous-espace spectral de Dirichlet sur $[\Lambda_-; \Lambda_+]$ pour $H(h)$:

$$\vec{d}(\text{Vect}\{\chi\psi(h)\}, E) \leq \left(\frac{1}{1 + o(1)} \right)^{1/2} \frac{h^\alpha}{h^{\alpha/2}} = o(1), \quad h \rightarrow 0. \quad (12.3.27)$$

Ainsi pour $h > 0$ assez petit, il y a au moins une valeur propre $\lambda(h)$ de $H_D(h)$ dans $[\lambda_0 - \varepsilon; \lambda_0 + \varepsilon] + \mathcal{O}(h^{\alpha/2})$. Finalement, on a :

$$s(h) \geq 1, \quad h \rightarrow 0 \quad (12.3.28)$$

et avec (12.3.25) on obtient $s(h) = 1$. Enfin on a aussi

$$\limsup_{h \rightarrow 0} \lambda(h) \leq \lambda_0 + \varepsilon, \quad \text{et} \quad \liminf_{h \rightarrow 0} \lambda(h) \geq \lambda_0 - \varepsilon, \quad (12.3.29)$$

ce qui achève la preuve du théorème, ε étant arbitraire. ■

12.11. Remarque.

1. Noter que les positions limites ne dépendent pas du choix de l'ouvert Ω contenant c . Ainsi, où que l'on mette les conditions de Dirichlet autour de c , les valeurs propres se positionnent asymptotiquement de la même façon sous l'hypothèse de convergence du potentiel total.
2. On voit que dans la preuve, le caractère borné de la famille $\{\tilde{\mathcal{V}}^h\}_{h>0}$ dans $W^{1,\infty}(I)$ est cruciale, puisqu'elle permet de d'obtenir des vecteurs propres approchés : d'ailleurs, on vérifie facilement que le théorème est faux si on l'applique avec $\tilde{\mathcal{V}}^h = W^h$. Dans ce cas en effet, on a $V^h = \tilde{V}^h$, et comme $H_D^\Omega(h)$ est alors semi-borné par $\Lambda_0 > \Lambda_*$, il n'y a sûrement pas de valeurs propres pour tout h .
3. La preuve a mis en évidence un taux de convergence $\tau(h)$ vérifiant

$$\tau(h) = \mathcal{O}(\max(\|\tilde{\mathcal{V}}^h - \tilde{\mathcal{V}}^0\|; h^\beta)),$$

avec β quelconque dans $[0; 1[$, ce qui est optimal, comme le montre le cas particulier où $\tilde{\mathcal{V}}^h(x) \equiv |\ln h|^{-1}$ par exemple.

4. Remarquer enfin que l'on peut affaiblir la condition "Lipschitz-borné" par "localement Lipschitz-borné". On peut enfin remplacer l'hypothèse "borné dans $W^{1,\infty}$ " par "borné dans un espace de Hölder $C^{0,\mu}$ ", ce qui modifie le terme résiduel du point 3 précédent.

12.4 Estimations sur la résolvante

Si $(\phi_n(h))_{n \in \mathbb{N}^*}$ désigne une base orthormée du problème de Dirichlet $H_D^\Omega(h)$ pour le problème à un puits, on sait que la résolvante est un opérateur intégral (puisque la résolvante est de type Hilbert-Schmidt). Son noyau est donné par

$$(H_D(h) - z)^{-1}[x, y] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n(h) - z} \phi_n(x) \overline{\phi_n(y)} \quad (12.4.1)$$

Si on s'intéresse aux $z \in \mathbb{C}$ sur un contour à distance finie d'une valeur propre $\lambda_n(h) < \Lambda_0$ on voit d'après la décroissance des fonctions propres, que pour la

fonction propre ϕ_n correspondante, en notant d la distance d'Agmon à l'énergie $\lambda_n(h)$:

$$\phi_n(x) \overline{\phi_n(y)} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(d(x;c)+d(c;y))/h}) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-d(x;y)/h}). \quad (12.4.2)$$

C'est ce que l'on va démontrer pour le noyau de la résolvante (éléments de preuve issus de [HeSj2] ou [DiSj]) :

■ **12.12. Notation.** On fixe $\eta > 0$ et soit χ^η une fonction plateau C^∞ supportée dans $[-\eta; \eta]$. Pour $p \in]a; b[$, on notera

$$\chi_p^\eta(x) := \chi^\eta(x - p).$$

Avec ces notations, on a alors

■ **12.13. Proposition.** Soit $z \in \mathbb{C}$ et $\lambda := \operatorname{Re} z$. Supposons que

$$r(h) := \operatorname{dist}(z; \sigma(H_D(h))) > 0.$$

Alors, pour $\eta > 0$ assez petit, et pour tous x_0, y_0 dans Ω , l'opérateur $\chi_{x_0}^\eta (H_D^\Omega(h) - z)^{-1} \chi_{y_0}^\eta$ est borné de L^2 dans H^1 et

$$\|\chi_{x_0}^\eta (H_D^\Omega(h) - z)^{-1} \chi_{y_0}^\eta\| \lesssim_\eta e^{-d(x_0; y_0)/h} / r(h).$$

Rappelons que pour $\eta > 0$, la notation $f(h) \lesssim_\eta g(h)$ signifie que pour $h \rightarrow 0$, $f(h) \leq C_\eta e^{c_0 \eta / h} g(h)$, la constante c_0 ne dépendant pas de η .

12.14. Remarque.

1. Ainsi, pour $r(h)$ uniformément minoré par rapport à h , pour un second membre f localisé autour de y_0 , la solution du problème $(H_D^\Omega(h) - z)u = f$ décroît d'autant exponentiellement vite qu'elle s'éloigne de y_0 .
2. Ce résultat est intéressant dans la mesure où du point de vue géométrique, seule la région hors puits est elliptique. Une estimation d'Agmon directe ne donne pas d'information autour de $x = c$ sur le comportement de u .
3. Néanmoins, la proposition permet de dire que pour des énergies voisines d'une valeur propre $\lambda < \Lambda_0$ la traversée de la région U^h coûte un facteur $\operatorname{dist}(\lambda; \sigma(H_D))^{-1}$, dans les estimations ponctuelles de décroissance cf. figure 12.4.

Preuve. On se ramène au problème de Dirichlet hors-puits, qui est fortement elliptique. Soit $\tilde{\Omega} := \Omega \setminus \{|x - c| \leq \eta\}$ et $H_D^{\tilde{\Omega}}(h)$ la réalisation de Dirichlet de $P(h)$ sur $\tilde{\Omega}$. Noter que pour $h > 0$ assez petit $(\mathcal{V}^h - W^h)|_{\tilde{\Omega}} = \tilde{\mathcal{V}}^h$.

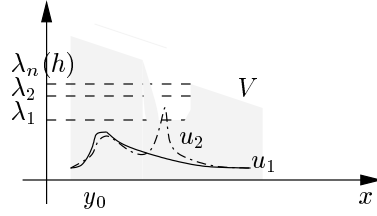


Figure 12.4. plus z s'éloigne du spectre de $H_D^\Omega(h)$, plus la solution u de $(H_D^\Omega(h) - z)u = f$ est petite dans les régions non-elliptiques.

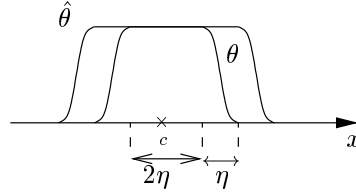


Figure 12.5. Fonctions θ et $\hat{\theta}$.

Soit ensuite $\theta, \hat{\theta}$ deux fonctions plateau C^∞ à support respectivement dans $\{|x - c| \leq 2\eta\}$ et $\{|x - c| \leq 4\eta\}$, et valant 1 respectivement sur $\{|x - c| \leq \eta\}$ et au voisinage du support de θ .

Comme pour toute $f \in L^2(\Omega)$, $(1 - \hat{\theta})f \in L^2(\tilde{\Omega})$, on a

$$v := (H_D^{\tilde{\Omega}}(h) - z)^{-1}(1 - \hat{\theta})f \in D(H_D^{\tilde{\Omega}}(h)). \quad (12.4.3)$$

Par suite $(1 - \theta)v$ est dans le domaine de $H_D^\Omega(h)$, et

$$(P(h) - z)(1 - \theta)v = (1 - \theta)(P(h) - z)v - [P(h), \theta]v = (1 - \hat{\theta})fv - [P(h), \theta]v, \quad (12.4.4)$$

ayant utilisé que $(1 - \theta)(1 - \hat{\theta}) = (1 - \hat{\theta})$. Finalement, pour toute $f \in L^2(\Omega)$:

$$(1 - \theta)v = (H_D^\Omega(h) - z)^{-1}(1 - \hat{\theta})f - [P(h), \theta](H_D^{\tilde{\Omega}}(h) - z)^{-1}(1 - \hat{\theta})f, \quad (12.4.5)$$

ce qui donne

$$(1 - \theta)(H_D^{\tilde{\Omega}}(h) - z)^{-1}(1 - \hat{\theta}) = [H_D^{\tilde{\Omega}}(h) - z]^{-1}(1 - \hat{\theta}) - [P(h), \theta](H_D^{\tilde{\Omega}}(h) - z)^{-1}(1 - \hat{\theta}). \quad (12.4.6)$$

Ajoutant à l'équation le terme $(H_D^{\tilde{\Omega}}(h) - z)^{-1}\hat{\theta}$, et écrivant que $[P(h), \theta] = \hat{\theta}[P(h), \theta]$, on obtient la relation

$$\begin{aligned} (H_D^\Omega(h) - z)^{-1} &= (H_D^\Omega(h) - z)^{-1}\hat{\theta} \\ &\quad + (1 - \theta)(H_D^{\tilde{\Omega}}(h) - z)^{-1}(1 - \hat{\theta}) \\ &\quad + (H_D^\Omega(h) - z)^{-1}\hat{\theta} \cdot [P(h), \theta](H_D^{\tilde{\Omega}}(h) - z)^{-1}(1 - \hat{\theta}). \end{aligned} \quad (12.4.7)$$

Ceci étant, fixons y_0 dans Ω , $y_0 \notin \text{supp } \hat{\theta}$ et appliquons la relation ci-dessus à $\chi_{y_0}^\eta$. Cela donne, en posant $u_{y_0}^\eta := (H_D^\Omega(h) - z)^{-1} \chi_{y_0}^\eta$, et $\tilde{u}_{y_0}^\eta := (H_D^\Omega(h) - z)^{-1} \chi_{y_0}^\eta$:

$$u_{y_0}^\eta = (1 - \theta) \tilde{u}_{y_0}^\eta + (H_D^\Omega(h) - z)^{-1} \hat{\theta} \cdot [P(h), \theta] \tilde{u}_{y_0}^\eta. \quad (12.4.8)$$

Il est aisé d'obtenir des estimations ponctuelles pour $\tilde{u}_{y_0}^\eta$. En effet, appliquant l'égalité d'énergie (corollaire 8.9 p. 93) sur $\tilde{\Omega}$ avec le poids $\varphi := (1 - \eta)d(x, y_0)$, d désignant la distance d'Agmon à l'énergie $\lambda := Re z$, et $p = 1$ on obtient, puisque $\tilde{u}_{y_0}^\eta$ est nulle au bord de $\tilde{\Omega}$:

$$m \|e^{\varphi/h} \tilde{u}_{y_0}^\eta\|_{1,h}^2 \leq \|e^{\varphi/h} \chi_{y_0}^\eta\|_{L^1} \|e^{\varphi/h} \tilde{u}_{y_0}^\eta\|_{L^\infty}, \quad (12.4.9)$$

la constante m ne dépendant que de η . Avec l'injection $H^1 \hookrightarrow L^\infty$, cela donne

$$\|e^{\varphi/h} \tilde{u}_{y_0}^\eta\|_{1,h} \leq Ch^{-1} \|e^{\varphi/h} \chi_{y_0}^\eta\|_{L^1} \quad (12.4.10)$$

Sur le support de $\chi_{y_0}^\eta$, φ est d'ordre $(1 - \eta)\eta > 0$, d'où l'on tire l'estimation ponctuelle suivante, uniforme en $\eta > 0$, et $y_0 \in \Omega \setminus \text{supp } \hat{\theta}$:

$$\begin{aligned} \forall x \in \tilde{\Omega}, \quad |\tilde{u}_{y_0}^\eta(x)| &\leq \frac{C_\eta}{h} \|\chi\|_{L^1} e^{-(1-\eta)d(x, y_0)/h} \\ &\lesssim_\eta \|\chi\|_{L^1} e^{-d(x, y_0)/h} \end{aligned} \quad (12.4.11)$$

Avec l'ellipticité et en revenant à l'équation différentielle définissant $\tilde{u}_{y_0}^\eta$, on a les mêmes estimations pour la dérivée.

Estimons ensuite le deuxième terme du membre de droite de (12.4.8). On remarque que $v_{y_0}^\eta := [P(h), \theta] \tilde{u}_{y_0}^\eta$ est supportée dans la couronne $\{\eta \leq |x - c| \leq 2\eta\}$, est nulle au bord de Ω . Comme elle s'exprime à l'aide de $\tilde{u}_{y_0}^\eta$, et sa dérivée, elle vérifie, d'après (12.4.11), l'estimation ponctuelle (uniforme par rapport à η et y_0)

$$\forall x \in \tilde{\Omega}, \quad |v_{y_0}^\eta| \leq \frac{C_\eta}{h} \|\chi\|_{L^1} e^{-(1-2\eta)d(c, y_0)/h}. \quad (12.4.12)$$

Appliquant cette fois l'égalité du corollaire 8.11 (p. 93) à $u = (H_D^\Omega(h) - z)^{-1} v_{y_0}^\eta$, et avec $\varphi = (1 - \eta)d(x, c)$ on obtient que pour tout $x \in \Omega$:

$$\begin{aligned} |(H_D^\Omega(h) - z)^{-1} \hat{\theta} [P(h), \theta] \tilde{u}_{y_0}^\eta(x)| &\leq \frac{C_\eta}{h} \|\chi\|_{L^1} e^{-(1-4\eta)(d(c, y_0) + d(x, c))/h} \\ &\lesssim_\eta \|\chi\|_{L^1} e^{-(d(c, y_0) + d(x, c))/h} \end{aligned} \quad (12.4.13)$$

Il reste à effectuer les estimations pour $y_0 \in \text{supp } \hat{\theta}$. On prend $\varphi(x) := d(x; y_0)$, et u dans $L^2(\Omega)$, avec $\|u\| \leq 1$. On écrit ensuite, en posant

$$A_{x_0, y_0}(z) := \chi_{x_0}^\eta (H_D^\Omega(h) - z)^{-1} \chi_{y_0}^\eta$$

$$\|A_{x_0, y_0}(z)u\|_{L^2} \leq e^{-d(x_0; y_0)/h} \|e^{d(x_0; y_0)/h} \chi_{x_0}^\eta\|_{L^\infty} \|(H_D^\Omega(h) - z)^{-1} \chi_{y_0}^\eta u\|.$$

Par choix de x_0 et y_0 on a clairement sur le support de $\chi_{x_0}^\eta$,

$$\varphi(x) = -d(x_0; y_0) + \mathcal{O}(\eta), \quad (12.4.14)$$

et ceci uniformément en $h > 0$. Par ailleurs, d'après le théorème spectral,

$$\|(H_D^\Omega(h) - z)^{-1} \chi_{y_0}^\eta u\|_{L^2} \leq \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(H_D^\Omega(h)))} \|\chi_{y_0}^\eta u\|_{L^2}. \quad (12.4.15)$$

Mettant bout à bout ces deux dernières estimations, on a la majoration de (12.4.14)

$$\|(H_D^\Omega(h) - z)^{-1} \chi_{y_0}^\eta u\|_{L^2} \lesssim_\eta e^{-d(x_0; y_0)/h} / r(h) \|\chi_{y_0}^\eta\|_\infty \|u\|_{L^2}.$$

Cela donne l'estimation annoncée et par régularité elliptique, on a la même estimation de L^2 dans H^2 . Cela achève la preuve. ■

■ **12.15. Corollaire.** Soit $u \in L^2(\Omega)$. On a alors, pour tout $\eta > 0$, on a l'estimation ponctuelle suivante quand $h \rightarrow 0$:

$$\forall x \in \Omega, \quad |[(H_D^\Omega(h) - z)^{-1} u](x)| \lesssim_\eta \frac{e^{-d(x; \text{supp } u)/h}}{r(h)} \|u\|_{L^2},$$

où $r(h) = \text{dist}(z, \sigma(H_D^\Omega))$, et d désigne la distance d'Agmon à l'énergie $\lambda = \text{Re } z$ pour le potentiel $\tilde{V}^h - W^h$.

Preuve. Il suffit, pour η fixé, de considérer un recouvrement fini du support de u par des boules $\omega_{y_0} = [y_0 - \eta; y_0 + \eta]$, $y_0 \in \Omega$, puis une partition de l'unité $(\chi_{y_0}^\eta)$ subordonnée. On applique enfin la proposition précédente pour estimer la norme H^1 de chaque $\chi_{x_0}^\eta (H_D^\Omega(h) - z)^{-1} \chi_{y_0}^\eta u$, x_0 étant un point quelconque de Ω . ■

Étude du problème à N puits

Ce chapitre reprend fortement les résultats et notions du chapitre précédent. Le plan d'étude est le même. On montre en particulier que les fonctions propres du problème de Dirichlet pour une énergie asymptotiquement résonante ne se concentrent que dans les puits résonants (notion introduite dans ce chapitre), ce qui améliore sensiblement les résultats de décroissance du chapitre 11, où les fonctions propres pouvaient *a priori* se concentrer dans tous les puits.

Dans ce chapitre, l'intervalle Ω sera égal à l'île $I = [a; b]$, et $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ est une famille de fonctions dans $W^{1,\infty}(I)$. Ici, le nombre de puits est égal à $N \geq 1$.

13.1 Hypothèses

■ **13.1. Notation.** On notera $H_D(h) \equiv H_D$ la réalisation de Dirichlet sur I de l'opérateur

$$P(h) := -h d^2/dx^2 + \tilde{\mathcal{V}}^h - W^h.$$

$$D(H_D(h)) = H^2(I) \cap H_0^1(I), \quad \forall u \in D(H_D(h)), \quad H_D(h)u := P(h)u.$$

■ **13.2. Hypothèse.** On suppose que la famille de fonctions $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ est dans $W^{1,\infty}(I)$, et uniformément bornée dans $W^{1,\infty}(I)$. On suppose en outre que :

$$\inf_{h>0} \inf_{x \in I} \tilde{\mathcal{V}}^h(x) \geq \Lambda_0 > 0, \quad (13.1.1)$$

et que la famille $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ converge dans $C^0(I)$. Notons $\tilde{\mathcal{V}}^0$ la limite :

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|\tilde{\mathcal{V}}^h - \tilde{\mathcal{V}}^0\|_\infty = 0. \quad (13.1.2)$$

L'idée est de découpler le problème à N puits en N problèmes à un puits. On peut d'ores et déjà introduire les énergies résonantes pour chaque puits, dont on sait qu'elles ne dépendent que de la limite $\tilde{\mathcal{V}}^0$, et non de l'ouvert sur lequel on pose des conditions de Dirichlet (cf. le point 1. de la remarque 12.3 du chapitre précédent).

■ **13.3. Notation.** Pour $i = 1 \dots N$, soit $H_i(h)$ le hamiltonien défini par

$$H_i(h) := H(h) + \sum_{k \neq i} w_k \left(\frac{\cdot - c_k}{h} \right) \equiv -h^2 \Delta + \tilde{\mathcal{V}}^h - w_i \left(\frac{\cdot - c_i}{h} \right).$$

On note \mathcal{E}_i l'ensemble des énergies asymptotiquement résonantes de $H_i(h)$:

$$\forall i = 1 \dots N, \quad \mathcal{E}_i = \{e_k^i + \tilde{\mathcal{V}}^0(c_i)\}_{k \in \mathbb{K}_i},$$

où, rappelons-le, $(e_k^i)_{k \in \mathbb{K}_i}$ désigne la suite strictement croissante (éventuellement infinie) des valeurs propres négatives du Hamiltonien $\hat{H}_0 = -d^2/dx^2 - w_i$ sur $L^2(\mathbb{R})$. On pose alors

$$\mu_k^i(0) := e_k^i + \tilde{\mathcal{V}}^0(c_i), \quad i = 1 \dots N, \quad k \in \mathbb{K}_i.$$

13.4. Remarque.

1. Les e_k^i étant des valeurs propres simples, on sait que pour i donné dans $\{1 \dots N\}$, les $\mu_k^i(0)$ sont deux à deux distincts :

$$\forall i \in \{1 \dots N\}, \forall k \in \mathbb{K}_i, k' \in \mathbb{K}_{i'}, \quad k \neq k' \Rightarrow \mu_k^i(0) \neq \mu_{k'}^{i'}(0).$$

2. Néanmoins, pour deux indices i, i' distincts on peut tout à fait avoir deux indices k, k' tels que $\mu_k^i(0) = \mu_{k'}^{i'}(0)$. D'après le point précédent, le nombre d'indices k par puits ne pouvant excéder un, on déduit que le nombre total d'indices k en question ne peut excéder le nombre total de puits, c'est-à-dire N .
3. Cette dernière équation peut s'interpréter comme une condition de compatibilité sur le potentiel limite, à savoir

$$\tilde{\mathcal{V}}^0(c_i) - \tilde{\mathcal{V}}^0(c_{i'}) = e_{k'}^{i'} - e_k^i, \quad k \in \mathbb{K}_i, k' \in \mathbb{K}_{i'}.$$

4. Cette condition est satisfaite dans le cas très simple du double puits symétrique : $N = 2$, $\tilde{\mathcal{V}}^h$ constant sur I . On peut se reporter p.ex. pour une introduction au phénomène à [Ba] p.56, ou à l'article de [Ha], ou encore à [HeSj2].
5. Cette dernière remarque pose le problème suivant : si les valeurs propres s'approximent bien en découplant les N puits (*i.e.* la somme directe des problèmes à un puits est une bonne approximation spectrale), ce découplage ne rend pas compte de la géométrie globale puisque les fonctions propres de $H_D(h)$ se délocalisent dans les N puits (ce qui n'est évidemment pas le cas des fonctions propres du problème à un puits !).

13.2 Énergies résonantes. Multiplicité. Puits résonants

Le point 2. de la remarque précédente souligne la question de la multiplicité, ce qui incite à introduire la

■ **13.5. Définition.** Pour $\lambda \in \mathbb{R}$, on pose

$$J(\lambda) := \{i \in \{1 \dots N\} \mid \lambda \in \mathcal{E}_i\},$$

$$m(\lambda) := \text{Card } J(\lambda).$$

L'entier $m(\lambda)$ s'appelle la multiplicité asymptotique de l'énergie λ .

13.6. Remarque. D'après le point 1. de la remarque précédente, si pour i fixé, il existe un indice $k_i \in \mathbb{K}$ tel que $\lambda = \mu_{k_i}^i(0) \in \mathcal{E}_i$, il est unique.

Cela permet de définir les énergies (asymptotiquement) résonantes pour $H(h)$:

■ **13.7. Définition.** Si $J(\lambda)$ est non vide, on dira que λ est une énergie résonante pour $H(h)$. En outre, pour tout $i \in J(\lambda)$, on dira que le puits c_i est résonant pour $H(h)$ à l'énergie λ .

■ **13.8. Notation.** On notera $\mathcal{E}(H(h))$ l'ensemble des énergies résonantes pour $H(h)$:

$$\mathcal{E}(H(h)) := \{\lambda \in \mathbb{R} \mid J(\lambda) \neq \emptyset\}.$$

13.9. Remarque.

1. Là encore, la définition est consistante puisque l'ensemble $\mathcal{E}(H(h))$ ne dépend que du potentiel limite \mathcal{V}^0 , des puits c_i et des fonctions w_i . Par ailleurs, dans le cas où $N = 1$, on retrouve la même définition 12.6 de $\mathcal{E}(H(h))$ introduite p. 127.
2. Une façon plus formelle de définir les notions de puits résonants et de multiplicité consiste à introduire la projection Π définie sur une réunion disjointe par

$$\Pi : \bigsqcup_{i=1}^N \mathcal{E}_i \longrightarrow \mathbb{R}, \quad (\lambda, i) \mapsto \lambda,$$

La multiplicité de λ est définie comme le cardinal de la fibre au-dessus de λ , et les puits résonants comme les puits associés aux points de la fibre.

3. En particulier, si $J \subset \{1 \dots N\}$, on a

$$\mathcal{E} \left(H(h) + \sum_{i \in J} w_i \left(\frac{\cdot - c_i}{h} \right) \right) = \Pi \left(\bigsqcup_{i \notin J} \mathcal{E}_i \right).$$

D'après le théorème 12.9 p.128 du chapitre précédent pour le problème à un puits, on a la caractérisation suivante des puits résonants

■ 13.10. Proposition. *Le puits c_i est résonant à l'énergie λ pour $H_D(h)$ si et seulement si il existe un ouvert Ω contenant c_i tel que pour tout ouvert $\omega_i \subset \Omega$ contenant c_i , la réalisation de Dirichlet $H_D^{\omega_i}(h)$ de $P(h)$ sur ω_i possède une valeur propre convergeant vers λ .*

13.11. Remarque. Dans ce cas cette valeur propre est la seule valeur propre de $H_D^{\omega_i}(h)$ dans un voisinage indépendant de h de λ : appliquer le théorème 12.9 p.128 à $H_D^{\omega_i}(h)$ sur un petit compact contenant λ .

On se restreint ensuite, comme au chapitre précédent, à un domaine d'énergie compact :

■ 13.12. Hypothèse. *On fixe un segment $[\Lambda_*; \Lambda^*] \subset (-\infty; \Lambda_0[$ et on étudiera pour tout $h > 0$ l'ensemble :*

$$\sigma(H_D(h)) \cap [\Lambda_*; \Lambda^*].$$

D'après l'étude du problème à un puits du chapitre précédent, on se doute que les énergies résonantes dans $[\Lambda_*; \Lambda^*]$ vont correspondre aux positions limites du spectre de $H_D(h)$ dans cet intervalle. Pour chaque indice i , on remarque que l'ensemble \mathcal{E}_i est, par définition des e_k , un ensemble discret admettant comme seul point d'accumulation éventuel le point $\tilde{\mathcal{V}}^0(c_i) \geq \Lambda_0 > \Lambda_*$. Par suite, pour chaque $i = 1 \dots N$, les ensembles $\mathcal{E}_i \cap [\Lambda_*; \Lambda^*]$ sont finis, et $\mathcal{E}(H_D(h)) \cap [\Lambda_*; \Lambda^*]$ est lui-même fini.

Cette dernière remarque incite à effectuer la partition du domaine d'énergie $[\Lambda_*; \Lambda^*]$ suivante :

■ **13.13. Notation.** On pose $\mathcal{E}_{rés} := \mathcal{E}(H_D(h)) \cap [\Lambda_*; \Lambda^*]$, $r := \text{Card } \mathcal{E}_{rés}$, et on notera

$$\mathcal{E}_{rés} := \{\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_r\}, \quad \Lambda_* \leq \lambda_1 < \lambda_r \leq \Lambda^*.$$

Enfin on posera pour tout $l = 1 \dots r - 1$,

$$3\varepsilon_l := \lambda_{l+1} - \lambda_l > 0, \quad 3\varepsilon_0 := \text{dist}(\lambda_1, \mathcal{E}(H_D(h)) \setminus \mathcal{E}_{rés.}) > 0$$

$$3\varepsilon_r := \text{dist}(\lambda_r, \mathcal{E}(H_D(h)) \setminus \mathcal{E}_{rés.}) > 0,$$

le symbole dist désignant la distance euclidienne usuelle.

Ainsi les intervalles $[\lambda_l - 2\varepsilon_{l-1}; \lambda_l + 2\varepsilon_l]$ pour $l = 1 \dots r$ forment un recouvrement d'un voisinage compact de $[\Lambda_*; \Lambda^*]$ (figure 13.1).

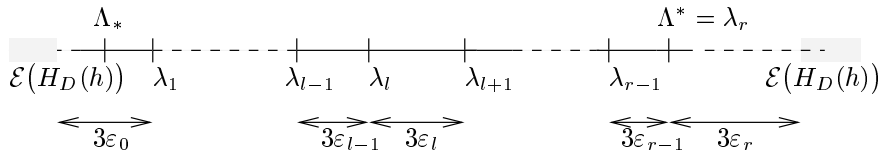


Figure 13.1. Définition des nombres ε_l .

13.3 Effet tunnel aux puits non résonants

La terminologie employée dans la section précédente est justifiée par le résultat suivant, qui précise le résultat énoncé de décroissance des fonctions propres (théorème 11.4 p. 120) :

■ **13.14. Proposition.** Soit $\lambda \in \mathcal{E}(H_D(h)) \cap [\Lambda_*; \Lambda^*]$, et soit c_i un puits non résonant à l'énergie λ . Alors il existe un voisinage ω_i de $\{c_i\}$, un voisinage Λ de λ et une constante $c > 0$ tels que pour $h > 0$ assez petit et pour toute valeur propre $\lambda(h)$ de $H_D(h)$ dans Λ on ait :

$$\forall x \in \omega_i, \quad |\phi(h)(x)| \leq e^{-c/h}, \quad (13.3.1)$$

où $\phi(h)$ est un vecteur propre normalisé dans L^2 pour la valeur propre $\lambda(h)$.

Autrement dit, la fonction propre est exponentiellement petite dans les puits non-résonants et se localise dans les puits résonants.

Preuve. Notons $H_D^{\omega_i}(h)$ la réalisation de Dirichlet de $P(h)$ à un ouvert $\omega_i \subset I$ qu'on peut supposer ne contenir que le seul puits c_i . Soit ensuite θ_i une fonction plateau C^∞ supportée dans ω_i et valant 1 sur un η -voisinage de c_i , $\eta > 0$ petit fixé. Fixons ensuite un voisinage Λ de λ de la forme $[\lambda - 2\varepsilon; \lambda + 2\varepsilon]$ tel que

$$\sigma(H_D^{\omega_i}(h)) \cap \Lambda = \emptyset, \quad h \rightarrow 0.$$

Un tel Λ existe puisque d'après la proposition 13.10 que l'on peut appliquer à $H_D^{\omega_i}(h)$ (quitte à réduire ω_i) : les valeurs propres de $H_D^{\omega_i}(h)$ dans $[\Lambda_*; \Lambda^*]$ se positionnent quand $h \rightarrow 0$ par définition sur $\mathcal{E}_i(\tilde{\mathcal{V}}^0) \cap [\Lambda_*; \Lambda^*]$, qui est un ensemble fini ne contenant pas λ . On a alors pour un vecteur propre normalisé $\phi(h)$ de $H_D(h)$, associé à la valeur propre $\lambda(h) \in \Lambda$,

$$P(h)\theta_i\phi(h) = \lambda(h)\theta_i\phi(h) + [P(h), \theta_i]\phi(h). \quad (13.3.2)$$

Comme $\lambda(h) \leq \Lambda_* < \Lambda_0$, le terme résiduel satisfait dans $L^2(I)$, d'après le corollaire 11.7 (p.123)

$$\|[P(h), \theta_i]\phi(h)\|_{L^2(I)} \leq C_\eta e^{-c_0\eta/h}, \quad c_0 > 0, \quad h \rightarrow 0. \quad (13.3.3)$$

Le vecteur $\theta_i\phi(h)$ n'est pas nul, sinon quoi il n'y a rien à montrer (de toute façon par unicité de Cauchy, une fonction propre du problème de Dirichlet ne peut s'annuler qu'en des points isolés). En appliquant le théorème 9.7 (p.97) à $A = H_D^{\omega_i}(h)$ sur $[\lambda - \varepsilon; \lambda + \varepsilon]$, avec $N = 1$, $\psi_1 = \theta_i\phi_j(h)$ et $a = \varepsilon > 0$, on obtient, compte tenu de (13.3.3)

$$\vec{d}(\text{Vect } \{\theta_i\phi_j(h)\}; F_i) \leq \frac{1}{\|\theta_i\phi_j(h)\|_{L^2}} \frac{C_\eta e^{-c\eta/h}}{a}, \quad (13.3.4)$$

où l'on a noté F_i le sous-espace spectral de $H_D^{\omega_i}(h)$ sur $[\lambda - \varepsilon; \lambda + \varepsilon]$. Or, le puits c_i n'est pas résonant, on déduit donc que F_i est réduit à zéro. D'après les propriétés

de la distance entre sous-espaces (proposition 9.6 p.97), cette dernière est alors minorée par 1. On a donc

$$\frac{ae^{c\eta/h}}{C_\eta} \|\theta_i \phi_j(h)\|_{L^2} \leq \frac{1}{d(\text{Vect}\{\theta_i \phi_j(h)\}; F_i)} \leq 1 \quad (13.3.5)$$

Revenant à l'équation différentielle (13.3.2), on obtient des estimations ponctuelles par ellipticité. Cela prouve la proposition. ■

13.4 Spectre limite de Dirichlet

On choisit des ouverts convenables afin d'approcher le problème à N puits par N problèmes à 1 puits.

■ **13.15. Notation.** On fixe dans toute la suite une énergie résonante $\lambda_l \in \mathcal{E}_{\text{rés}}$, et on notera d la distance d'Agmon pour le potentiel total $\tilde{V}^h - W^h$ à l'énergie λ_l . On pose :

$$S_1 := \min_{j \neq k} d(c_j; c_k).$$

On pose alors pour $i = 1 \dots N$ et $\eta > 0$ assez petit fixé

$$\Omega_i := I \setminus \bigcup_{j \neq i} \{x \in [a; b] \mid d(x, c_j) \leq \eta\},$$

et on notera $H_D^{\Omega_i}(h)$ la réalisation de Dirichlet de $P(h)$ à l'ouvert Ω_i .

13.16. Remarque.

1. Noter que les ouverts Ω_i ne sont pas deux à deux disjoints, et que chaque Ω_i contient un seul puits : c_i . Ainsi les positions limites des valeurs propres de $H_D^{\Omega_i}(h)$ dans $[\Lambda_*; \Lambda^*]$ sont les $\mu_k^i(0)$ dans $\mathcal{E}_{\text{rés}}$. On a de plus l'inclusion canonique et isométrique avec domaines

$$L^2(\Omega_i) \hookrightarrow L^2(I),$$

qui permet de voir $H_D^{\Omega_i}(h)$ comme opérateur non borné sur $L^2(I)$.

2. Sur le choix de S_1 : il est curieux de faire intervenir dans la définition de S_1 les puits non-résonants à l'énergie λ_l . Si l'on souhaite les éliminer, il faut étudier plus finement la résolvante de $H_D(h)$ pour améliorer les estimations de décroissance des fonctions propres. Ce travail, qui reprend [HeSj2], est effectué dans la dernière section de ce chapitre.

3. Sur le choix des ouverts Ω_i : on aurait pu prendre pour $i = 1 \dots N$, $\Omega_i = \{x \in I \mid d(c_i, x) \leq S_1/2\}$, qui sont disjoints deux à deux. On disposerait de même d'une inclusion isométrique

$$\oplus_{i=1}^N L^2(\Omega_i) = L^2(\cup_{i=1}^N \Omega_i) \hookrightarrow L^2(I),$$

la somme étant de plus orthogonale. Cela permet de considérer alors l'opérateur fortement découpé $\oplus_{i=1}^N H_D^{\Omega_i}(h)$. On obtiendrait un résultat analogue au théorème 13.22 ci-après à ceci près que le terme résiduel dans *iv*) serait moins bon.

Appliquant le théorème 12.9 (p.128) à $H_D^{\Omega_i}(h)$ pour $i \in J(\lambda)$, on obtient :

■ **13.17. Proposition.** Soit $\lambda_l \in \mathcal{E}_{rés}$, et $i \in J(\lambda_l)$. Alors pour $h > 0$ assez petit :

- i) $H_D^{\Omega_i}(h)$ possède une unique valeur propre $\mu_i(h)$ dans l'intervalle $[\lambda_l - \varepsilon_{l-1}; \lambda_l + \varepsilon_l]$.
- ii) $H_D^{\Omega_i}(h)$ n'a pas de valeur propre dans l'intervalle $]\lambda_l - 2\varepsilon_{l-1}; \lambda_l - \varepsilon_{l-1}[\cup]\lambda_l + \varepsilon_l; \lambda_l + 2\varepsilon_l[$.
- iii) $\mu_i(h)$ converge dans $[\Lambda_*; \Lambda^*]$ et $\lim_{h \rightarrow 0} \mu_i(h) = \lambda_l$.

■ **13.18. Notation.** Pour $i \in J(\lambda_l)$, on notera $\psi_i(h)$ un vecteur propre normalisé associé à la valeur propre $\mu_i(h)$:

$$\forall i \in J(\lambda_l), \quad H_D^{\Omega_i}(h)\psi_i(h) = \mu_i(h)\psi_i(h), \quad \|\psi_i(h)\|_{L^2(\Omega_i)} = 1.$$

Cela étant précisé on peut écrire le théorème correspondant pour le problème à N puits.

■ **13.19. Théorème.** Soit $\lambda_l \in \mathcal{E}_{rés}$. Alors pour $h > 0$ assez petit :

- i) $H_D(h)$ possède $m(\lambda_l)$ valeurs propres dans l'intervalle $[\lambda_l - \varepsilon_{l-1}; \lambda_l + \varepsilon_l]$.
- ii) $H_D(h)$ n'a pas de valeurs propres dans l'intervalle $[\lambda_l - 2\varepsilon_{l-1}; \lambda_l - \varepsilon_{l-1}] \cup [\lambda_l + \varepsilon_l; \lambda_l + 2\varepsilon_l]$.
- iii) Notons $\lambda_1(h) \dots \lambda_{m(\lambda_l)}(h)$ les valeurs propres de $H_D(h)$ données par i). Alors pour tout $j = 1 \dots m(\lambda_l)$, $\lambda_j(h)$ converge dans $[\Lambda_*; \Lambda^*]$ et $\lim_{h \rightarrow 0} \lambda_j(h) = \lambda_l$.
- iv) Si Φ désigne le sous-espace spectral de $H_D(h)$ sur $[\lambda_l - \varepsilon_{l-1}; \lambda_l + \varepsilon_l]$ et Ψ le sous-espace engendré par les ψ_i ($i = 1 \dots m(\lambda)$), on a

$$\vec{d}(\Phi; \Psi) = \vec{d}(\Psi; \Phi) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_1/h}), \quad h \rightarrow 0.$$

Preuve. On utilise de nouveau le théorème de comparaison, mais avec une différence par rapport à la preuve du théorème dans le cas d'un puits.

1. **Notations.** Notons $\lambda_1(h) \dots \lambda_s(h)$ les valeurs propres de $H_D(h)$ dans l'intervalle $[\lambda_l - 2\varepsilon_{l-1}; \lambda_l + 2\varepsilon_l]$, $\phi_1(h) \dots \phi_{s(h)}(h)$ un système orthonormé de vecteurs propres associés, et $\Phi := \text{Vect} \{ \phi_1(h) \dots \phi_{s(h)}(h) \}$.

D'après l'estimation *a priori* de la proposition 10.13 p. 108 sur le nombre de valeurs propres, on a

$$s(h) = \mathcal{O}(1), \quad h \rightarrow 0. \quad (13.4.1)$$

Introduisons une fonction plateau $\theta \in C^\infty$ et paire supportée dans un voisinage de $[-3\eta; 3\eta]$ valant 1 sur $[-\eta; \eta]$ (rappelons que Ω_i dépend de η) et soit (cf. figure 13.2)

$$\forall i = 1 \dots N, \quad \theta_i(x) := \theta(x - c_i), \quad \chi_i(x) := 1 - \sum_{j \neq i}^N \theta_j(x). \quad (13.4.2)$$

Remarquer que pour η assez petit, les supports des θ_i sont deux à deux disjoints. Notons enfin $X\Psi := \text{Vect} \{ \chi_i \psi_i(h) \}_{i \in J(\lambda_l)}$.

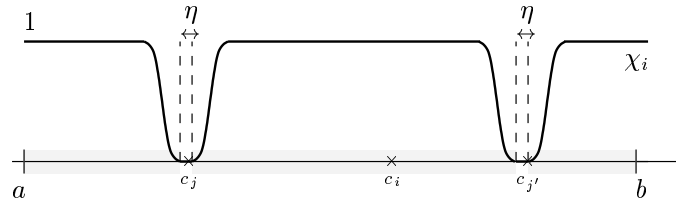


Figure 13.2. Ouvert Ω_i (en gris) et fonction χ_i .

Commençons par montrer que les sous-espaces Ψ et $X\Psi$ sont interchangeables dans les estimations, au sens où :

$$\forall \eta > 0, \quad \vec{d}(\Psi, X\Psi) = \vec{d}(X\Psi, \Psi) = \mathcal{O}_\eta(e^{-(S_1 - \eta)/h}), \quad h \rightarrow 0. \quad (13.4.3)$$

Remarquons en effet qu'avec les propriétés de décroissance des $\psi_i(h)$, la valeur propre $\mu_i(h)$ tendant vers λ_l , on a dans $L^2(I)$ (cf. *ii*) du théorème 11.4 p. 120)

$$\forall \eta > 0, \quad \forall i, i' \in \{1 \dots m(\lambda_l)\}, \quad \langle \psi_i(h), \psi_{i'}(h) \rangle = \delta_{i,i'} + \mathcal{O}_\eta(e^{-(S_1 - \eta)/h}) \quad (13.4.4)$$

ainsi que l'estimation ponctuelle suivante :

$$\forall x \in I, \quad \forall i = 1 \dots m(\lambda_l), \quad |(1 - \chi_i)\psi_i(h)(x)| \lesssim_\eta e^{-S_1/h}. \quad (13.4.5)$$

De là il découle bien

$$\vec{d}(\Psi, X\Psi) \lesssim_\eta e^{-S_1/h} < 1, \quad h \rightarrow 0, \quad (13.4.6)$$

et on obtient (13.4.3)

2. **Majoration de $s(h)$.** On montre que $s(h) \leq m(\lambda_l)$. Il suffit de montrer, Ψ étant de dimension $m(\lambda_l)$ que

$$\vec{d}(\Phi, \Psi) < 1 \quad h \rightarrow 0, \quad (13.4.7)$$

en appliquant le théorème de comparaison 9.7 p.97.

Pour prouver (13.4.7), revenant à la définition de \vec{d} , il suffit de prouver pour h assez petit, (puisque les $\phi_j(h)$ forment une base orthonormée de Φ) que l'on a :

$$\forall j = 1 \dots s(h), \quad \|(1 - \Pi_\Psi)\phi_j(h)\| < 1 \quad (13.4.8)$$

où Π_Ψ désigne le projecteur orthogonal sur Ψ . On analyse pour cela le comportement de $\phi_j(h)$ puits par puits. Soit θ_0 une fonction C^∞ positive définie par la relation :

$$1 = \theta_0(x) + \sum_{i \in J(\lambda_l)} \theta_i(x) \quad \forall x \in I. \quad (13.4.9)$$

Avec le choix de θ_0 il est clair, $\phi_j(h)$ étant exponentiellement petite sur un voisinage des puits non résonants à l'énergie λ_l (proposition 13.14), que l'on a

$$\|\theta_0 \phi_j(h)\|_{L^2(I)} \leq C_\eta e^{-c\eta/h} = o(1), \quad h \rightarrow 0, \quad (13.4.10)$$

ce qui élimine les puits non-résonants. Par ailleurs, on a pour $i \in J(\lambda_l)$

$$P(h)\theta_i \phi_j(h) = \lambda_j(h)\theta_i \phi_j(h) + [P(h), \theta_i]\phi_j(h) \quad (13.4.11)$$

et le commutateur est majoré dans L^2 par $C_\eta e^{-c'\eta/h}$. Fixons alors $\alpha > 0$ tel que

$$\alpha - c'\eta < 0.$$

α est en quelque sorte l'étalon du taux de concentration de $\phi_j(h)$ dans un puits. On distingue donc deux cas :

- (a) Si $\phi_j(h)$ a significativement de la masse dans le puits c_i , *i.e.* :

$$\|\theta_i \phi_j(h)\| \geq e^{-\alpha/h}, \quad (13.4.12)$$

alors en appliquant le théorème de comparaison à $A = H_D^{\Omega_i}(h)$ sur $[\lambda_l - \varepsilon_{l-1}; \lambda_l + \varepsilon_l]$, avec $a = \min\{\varepsilon_{l-1}; \varepsilon_l\} > 0$, $N = 1$, et $\psi_1 = \theta_i \phi_j(h)$, on obtient, compte tenu de (13.3.3) et (13.4.12)

$$\vec{d}(\text{Vect}\{\theta_i \phi_j(h)\}; \text{Vect}\{\psi_i(h)\}) \leq \left(\frac{1}{e^{-2\alpha/h}}\right)^{1/2} \frac{C_\eta}{a} e^{-c'\eta/h} = o(1), \quad (13.4.13)$$

puisque A ne possède que la valeur propre simple $\mu_i(h)$ dans $[\lambda_l - \varepsilon_{l-1}; \lambda_l + \varepsilon_l]$.

On obtient donc par définition de la distance

$$\|(1 - \Pi_\Psi)\theta_i\phi_j(h)\|_{L^2} \leq o(1) \cdot \|\theta\phi_j(h)\|_{L^2} = o(1) < 1, \quad h \rightarrow 0, \quad (13.4.14)$$

et $\Pi_\Psi\theta\phi_j(h)$ est une bonne approximation de $\theta\phi_j(h)$.

(b) Si *a contrario* $\|\theta_i\phi_j(h)\| \leq e^{-\alpha/h}$, comme le projecteur $1 - \Pi_\Psi$ est orthogonal, on a

$$\|(1 - \Pi_\Psi)\theta\phi_j(h)\|_{L^2} \leq \|\theta\phi_j(h)\| = o(1) < 1, \quad h \rightarrow 0,$$

et le vecteur nul est une bonne approximation dans F de $\theta\phi_j(h)$.

Dans tous les cas, on a donc, pour tout $j = 1 \dots s(h)$ et avec (13.4.10) :

$$\|(1 - \Pi)\theta_i\phi_j(h)\|_{L^2} = o(1), \quad \forall i \in J(\lambda_l) \cup \{0\} \quad h \rightarrow 0. \quad (13.4.15)$$

On déduit (13.4.8) à l'aide (13.4.15) et (13.4.9), l'indice j étant quelconque. Cela donne finalement (13.4.7) et la majoration :

$$s(h) \leq m(\lambda_l), \quad h \rightarrow 0. \quad (13.4.16)$$

3. **Minoration de $s(h)$.** On remarque alors que pour $i \in J(\lambda_l)$ et $h > 0$ assez petit, les $\mu_i(h)$ sont dans $[\lambda_l - \varepsilon_{l-1}; \lambda_l + \varepsilon_l]$ et les $\chi_i\psi_i(h)$ sont dans le domaine de $H_D(h)$.

$$H_D(h)\chi_i\psi_i(h) = \mu_i(h)\chi_i\psi_i(h) + [P(h), \chi_i]\psi_i(h). \quad (13.4.17)$$

Avec encore les propriétés de décroissance des fonctions propres de $H_D^{\Omega_i}(h)$ rappelées plus haut, on a

$$\forall i \in J(\lambda_l), \quad \|[P(h), \chi_i]\psi_i(h)\|_{L^2(\Omega_i)} \lesssim_\eta e^{-S_1/h}, \quad (13.4.18)$$

les coefficients de $[P(h), \chi_i]$ étant supportés autour des puits c_j pour $j \neq i$. Toujours d'après ces propriétés de décroissance, la matrice de Gram des $\chi_i\psi_i(h)$ est, *modulo* $e^{-S_1/h+4\eta/h}$, la matrice unité d'après (13.4.4).

Soit alors $\varepsilon > 0$ petit donné. Appliquons le théorème de comparaison avec Avec

$$A = H_D(h), \quad N = m(\lambda_l), \quad \psi_i = \chi_i\psi_i(h), \quad \mu_i = \mu_i(h).$$

On a $\mu_i(h) \in [\lambda_l - \varepsilon; \lambda_l + \varepsilon]$ pour $h > 0$ assez petit puisque les $\mu_i(h)$ tendent vers λ_l , et comme on a une majoration indépendante de $h > 0$ du nombre de valeurs propres de A dans $[\lambda_l - \varepsilon_{l-1}; \lambda_l + \varepsilon_l]$, le même argument de décompte que dans la preuve du théorème 12.9 dans le cas d'un puits

fournit $a(h) = h$ pour lequel on peut appliquer le théorème sur l'intervalle $[\lambda_l - \varepsilon; \lambda_l + \varepsilon]$ éventuellement élargi de $\mathcal{O}(h)$. On obtient

$$\vec{d}(X\Psi; \Phi) \leq \left(\frac{m(\lambda)}{1 + o(1)} \right)^{1/2} \frac{C_\eta}{h} e^{-S_1/h + 4\eta/h} \lesssim_\eta e^{-S_1/h}, \quad (13.4.19)$$

qui donne pour $h > 0$ assez petit :

$$m(\lambda_l) \leq s(h), \quad h \rightarrow 0, \quad (13.4.20)$$

et avec (13.4.16)

$$m(\lambda_l) = s(h), \quad h \rightarrow 0, \quad (13.4.21)$$

et que les valeurs propres $\lambda_j(h)$ de $H_D(h)$ sont dans $[\lambda_l - \varepsilon; \lambda_l + \varepsilon]$. Cela démontre *i)* et *ii)* Montrons *iii)*. Il suffit de remarquer que pour $j = 1 \dots m(\lambda_l)$,

$$\limsup_{h \rightarrow 0} \lambda_j(h) \leq \lambda_l + \varepsilon, \quad \text{et} \quad \liminf_{h \rightarrow 0} \lambda_j(h) \geq \lambda_l - \varepsilon, \quad (13.4.22)$$

et que ε est arbitrairement petit.

Quand à *iv)*, par inégalité triangulaire vraie pour \vec{d} , on a

$$\vec{d}(\Psi; \Phi) \leq \vec{d}(\Psi; X\Psi) + \vec{d}(X\Psi; \Phi).$$

Utilisant les majorations (13.4.19) et (13.4.6), on obtient l'inégalité " \leq " annoncée dans *iv)*. L'inégalité inverse découle de (13.4.7) et des propriétés de la distance \vec{d} (cf. proposition 9.6 p. 97). ■

13.20. Remarque.

1. Le point *iv)* du théorème exprime le fait que les vecteurs propres de $H_D(h)$ sont, *modulo* une erreur exponentiellement petite, des combinaisons normalisées dans L^2 des $\psi_i(h)$. Autrement dit la matrice du projecteur orthogonal restreint à Ψ écrite entre la base des $\psi_i(h)$ de Ψ et la base $\phi_1(h) \dots, \psi_{m(\lambda)}(h)$ est, à un exponentiellement petit près, une matrice unitaire.
2. En particulier, pour tout $i = 1, \dots, m(\lambda_l)$ si l'on pose

$$p_i(h) := \langle \psi_i(h), \phi_j(h) \rangle, \quad (13.4.23)$$

alors la quantité $|p_i(h)|^2$ est une approximation exponentiellement bonne du taux de concentration de $\phi_j(h)$ dans le puits résonant i et on a

$$\sum_{i=1}^{m(\lambda_l)} |p_i(h)|^2 = 1 + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_1/h}) \quad (13.4.24)$$

pour tout $\eta > 0$ assez petit. En particulier on a dans L^2

$$\forall j = 1 \dots (\lambda_l), \quad \phi_j(h) = \sum_i p_i(h) \psi_i(h) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_1/h}) \quad (13.4.25)$$

3. Dans la suite, on verra que l'on peut remplacer S_1 par

$$S(\lambda_l) := \inf_{j \neq k, j, k \in J(\lambda_l)} d(c_k; c_j) \geq S_1.$$

13.5 Estimations sur la résolvante

Ayant fait des estimations assez précises dans le cas à un puits, on peut faire des estimations semblables pour le cas à N puits.

On reprend les ouverts Ω_i , les fonctions θ_i et χ_i , ainsi que les N problèmes à un puits $H_D^{\Omega_i}(h)$ de la section précédente, $\eta > 0$ étant fixé. On introduit à présent des fonctions $\tilde{\chi}_i$ C^∞ à support dans Ω_i , telles que

$$\sum_{i=1}^N \tilde{\chi}_i = 1. \quad (13.5.1)$$

On reprend ici des éléments de démonstration issus de [HeSj3]. On construit par approximations successives l'inverse de $H_D(h) - z$. Un bon candidat semble être :

$$R_0 := \sum_{i=1}^N \chi_i T_i(z) \tilde{\chi}_i, \quad T_i(z) \equiv T_i := (H_D^{\Omega_i}(h) - z)^{-1}. \quad (13.5.2)$$

Rappelons (cf. prop. 12.13 p. 135) que l'on a établi au chapitre précédent que :

$$\forall i = 1 \dots N \quad \text{l'opérateur } \chi_{x_0} T_i(z) \chi_{y_0} \quad \text{est} \quad \mathcal{O}_\eta \left(\frac{e^{-(d(x_0, y_0) - c_0 \eta)/h}}{\text{dist}(z; \sigma(H_D^{\Omega_i}(h)))} \right) \quad (13.5.3)$$

la fonction d désignant la distance d'Agmon pour le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h - W^h$ à l'énergie $\lambda = \text{Re } z$. Rappelons également que $\chi_p = \chi(\cdot - p)$, pour une fonction plateau χ fixée valant 1 sur le support de θ , et supportée dans $[-4\eta; 4\eta]$. Avec ces notations on a :

■ **13.21. Proposition.** *Soit $z \in \mathbb{C}$ et $\lambda := \text{Re } z$. Supposons que*

$$r(h) := \text{dist}(z; \sigma(H_D(h))) > 0, \quad \text{et} \quad r(h) \geq e^{-S_1/2h}.$$

Alors, pour $\eta > 0$ assez petit, et pour tous x_0, y_0 dans $I = [a; b]$, l'opérateur $\chi_{x_0}(H_D(h) - z)^{-1} \chi_{y_0}$ est borné de L^2 dans H^1 et

$$\|\chi_{x_0}(H_D(h) - z)^{-1} \chi_{y_0}\| \lesssim_\eta \frac{e^{-d(x_0, y_0)/h}}{r(h)},$$

d désignant la distance d'Agmon pour le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h - W^h$ à l'énergie λ .

Preuve. On a par calcul direct

$$(H_D(h) - z)R_0 = \sum_{i=1}^N \chi_i \tilde{\chi}_i + \sum_{i=1}^N [P(h), \chi] T_i(z) \tilde{\chi}_i.$$

Comme $\chi_i \tilde{\chi}_i = \tilde{\chi}_i$, pour tout i , on a bien

$$(H_D(h) - z)R_0 = 1 + \sum_{i=1}^N [P(h), \chi] T_i \tilde{\chi}_i = 1 - \sum_{i=1}^N \sum_{k \neq i} [P(h), \theta_k] T_i \tilde{\chi}_i$$

(rappelons en effet que $\chi_i = 1 - \sum_{k \neq i} \theta_k$). Appelons ε le second terme du membre de droite de la dernière équation. On étudie la convergence de la série de terme général $R_0 \varepsilon^n$, pour $n \in \mathbb{N}$.

Remarquant que $\tilde{\chi}_i [P, \theta_k]$ est toujours nul sauf si $k = i$, et dans ce cas le produit vaut $[P, \theta_i]$, un calcul direct donne :

$$R_0 \varepsilon^n = \sum_{i_0=1}^N \sum_{i_1 \neq i_0}^N \cdots \sum_{i_n \neq i_{n-1}}^N \chi_{i_0} T_{i_0} [P, \theta_{i_1}] T_{i_1} [P, \theta_{i_2}] T_{i_2} \cdots [P, \theta_{i_n}] T_{i_n} \tilde{\chi}_{i_n} \quad (13.5.4)$$

On écrit alors pour $s = 0 \dots N-1$, en utilisant que θ_k est localisée autour du puits c_k

$$[P, \theta_{i_s}] T_{i_s}(z) [P, \theta_{i_{s+1}}] = [P, \theta_{i_s}] \chi_{c_{i_s}} T_{i_s}(z) \chi_{c_{i_{s+1}}} [P, \theta_{i_{s+1}}]. \quad (13.5.5)$$

D'après (13.5.3), on a en norme d'opérateur

$$\|\chi_{c_{i_s}} T_{i_s}(z) \chi_{c_{i_{s+1}}}\| = \mathcal{O}_\eta(e^{-(d(c_{i_s}, c_{i_{s+1}}) - c_o \eta)/h} / r(h)).$$

Par composition on trouve que l'opérateur $\chi_{x_0} R_0 \varepsilon^n \chi_{y_0}$ vérifie l'estimation en norme d'opérateur

$$\|\chi_{x_0} R_0 \varepsilon^n \chi_{y_0}\| = \mathcal{O}_\eta(e^{-\varphi_n(x_0, y_0)/h + n c_o \eta/h} / r(h)^{n+1}) \quad (13.5.6)$$

où

$$\varphi_n(x_0, y_0) = \min_{i_0 \dots i_n} d(y_0, c_{i_n}) + d(c_{i_n}; c_{i_{n-1}}) + \cdots + d(c_{i_1}; c_{i_0}) + d(c_{i_0}; x_0).$$

Noter $\varphi_n(x, y)$ est la longueur du plus court chemin parcouru pour aller de y à x en passant par n puits deux à deux distincts, et que

$$\varphi_n(x_0, y_0) \geq d(x_0, y_0) + n S_1. \quad (13.5.7)$$

Ainsi, en appliquant le corollaire 12.15 p. 138 à $\tilde{\chi}_i u$, u désignant une fonction arbitraire de $L^2(I)$, on trouve que le terme général est donc en norme d'opérateur $\mathcal{O}_\eta(e^{-n S_1/h + n c_o \eta/h} / r(h)^n)$, qui est manifestement convergent.

Finalement, on a bien

$$(H_D(h) - z)^{-1} = R_0(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon^n). \quad (13.5.8)$$

On obtient donc le résultat pour $\chi_{x_0}(H_D(h) - z)^{-1}\chi_{y_0}$ en écrivant (utiliser la continuité de composition des applications linéaires) que

$$\chi_{x_0}(H_D(h) - z)^{-1}\chi_{y_0} = \sum_{n=0}^{\infty} \chi_{x_0} R_0 \varepsilon^n \chi_{y_0} \quad (13.5.9)$$

et on majore chaque terme à l'aide de (13.5.6) et (13.5.7). ■

13.6 Estimation améliorée des fonctions propres

■ **13.22. Théorème.** Soit $\lambda_l \in \mathcal{E}_{rés}$ une énergie résonante pour $H_D(h)$, $l \in \{1 \dots r\}$ et $\lambda(h)$ une valeur propre de $H_D(h)$ convergeant vers λ_l . Soit $\phi(h)$ un vecteur propre normalisé dans $L^2(I)$ associé, et soit d la distance d'Agmon pour le potentiel $\mathcal{V}^h - W^h$ à l'énergie λ_l . Alors

$$\forall x \in I, \quad |\phi(h)(x)| = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-d(x, U(\lambda_l))/h})$$

où $U(\lambda_l) := \bigcup_{i \in J(\lambda_l)} \{c_i\}$. On a les mêmes estimations pour la dérivée de $\phi(h)$.

13.23. Remarque. Ce résultat précise celui de la proposition 13.14 puisqu'il permet de prendre la constante c égale à $c = d(U(\lambda_l); \{c_i\}_{i=1}^n \setminus U(\lambda_l))$.

Preuve. Soit $\lambda_1(h), \dots, \lambda_{m(\lambda_l)}(h)$ les $m(\lambda_l)$ valeurs propres de $H_D(h)$ convergeant vers λ_l . Soit $\phi(h)$ un vecteur propre de Dirichlet unitaire associé à une de ces valeurs propres. Posons ensuite

$$a(h) = \max_{i=1 \dots m(\lambda_l)} \{|\lambda_i(h) - \lambda_l|\}, \quad \text{et} \quad \alpha(h) := \max(h; a(h)),$$

et considérons le rectangle

$$\Lambda := [\lambda_l - \varepsilon_{l-1}; \lambda_l + 2a(h)] \subset [\lambda_l - \varepsilon_{l-1}; \lambda_l + \varepsilon_l].$$

D'après le point *iv*) du théorème 13.19 l'image Ψ du projecteur spectral $\Pi_D(h)$ de $H_D(h)$ vérifie

$$\vec{d}(\Phi, \Psi) = \vec{d}(\Psi, \Phi) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_1/h}). \quad (13.6.1)$$

Par ailleurs pour $h > 0$, on a $\lambda(h) \rightarrow \lambda_l$ on peut donc supposer que $\phi(h) \in \Phi$. Or, d'après (13.4.3) et l'inégalité triangulaire sur \vec{d} , on a pour $\eta > 0$ assez petit

$$\vec{d}(\Phi, X\Psi) \leq \vec{d}(\Phi, \Psi) + \vec{d}(X\Psi, \Psi) = \mathcal{O}_\eta(e^{-(S_1-\eta)/h}), \quad (13.6.2)$$

où, rappelons-le $X\Psi = \text{Vect} \{\chi\psi_i(h)\}_{i \in J(\lambda_l)}$. Ainsi, en restriction à $X\Psi$, $\Pi_D(h)$ est injectif, donc surjectif par égalité des dimensions : il existe un vecteur ψ de $X\Psi$ tel que

$$\phi(h) = \Pi_D(h)\psi, \quad \psi \in \Psi = \text{Vect} \{\psi_i(h)\}_{i \in J(\lambda_l)}. \quad (13.6.3)$$

Comme $\psi = \phi(h) + (1 - \Pi_D(h))\psi = \phi(h) + (1 - \Pi_D(h))\Pi_{X\Psi}\psi$, on a par définition de la distance entre sous-espaces

$$|\psi|^2 \leq 1 + \vec{d}(\Phi; X\Psi)|\psi|^2, \quad \text{i.e.} \quad |\psi|^2 = 1 + \mathcal{O}_\eta(e^{-S_1/h + c\eta/h}), \quad (13.6.4)$$

la constante c ne dépendant pas de η . Par définition de $X\Psi$, il existe des scalaires $\alpha_1 \dots \alpha_{m(\lambda_l)}$ (dépendants de $h > 0$) tels que

$$\psi = \sum_{i=1}^{m(\lambda_l)} \alpha_i \chi_i \psi_i(h), \quad (13.6.5)$$

et avec (13.6.4) et le caractère quasi-orthonormé des $\chi_i \psi_i(h)$, on obtient la majoration de α_i , à savoir

$$\sum_{i=1}^{m(\lambda_l)} |\alpha_i|^2 \leq 1 + \mathcal{O}_\eta(e^{-S_1/h + c\eta/h}) \leq 2. \quad (13.6.6)$$

Il suffit donc d'après la décomposition (13.6.5) et la représentation (13.6.3) de $\phi(h)$ de prouver que :

$$\forall i \in J(\lambda_l), \quad \forall x \in I, \quad \Pi_D(h)\chi_i \psi_i(h)(x) = \mathcal{O}_\eta(e^{-(d(x, c_i)/h - c_o \eta/h)}). \quad (13.6.7)$$

Cette estimation ponctuelle n'est pas claire car elle demande de passer du niveau spectral (norme L^2 du projeté) au niveau géométrique (estimations ponctuelles). Ce passage s'effectue par les estimations de résolvante : on remarque pour cela que

$$(P(h) - z)\chi_i \psi_i(x) = (\mu_i(h) - z)\chi_i \psi_i + [P(h), \chi_i]\psi_i$$

D'où pour $z \neq \mu_i$:

$$(\mu_i(h) - z)^{-1} \chi_i \psi_i = (H_D(h) - z)^{-1} \chi_i \psi_i + (\mu_i(h) - z)^{-1} (H_D(h) - z)^{-1} [P(h), \chi_i] \psi_i.$$

L'intérêt de cette écriture réside dans le fait que la fonction $[P(h), \chi_i]\psi_i$ est bien localisée. Intégrons sur cette expression sur le bord γ du rectangle $\Lambda \times [-ih; ih]$ (cf. figure 13.6). Le choix de ce contour est motivé par les faits suivants :

1. Pour tout z sur ce rectangle, la distance de z au spectre de $H_D(h)$ est minorée par $1/h$.

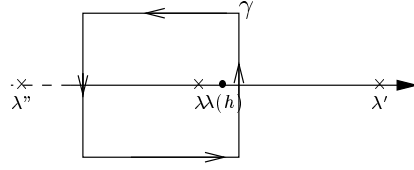


Figure 13.3. Contour γ . Les valeurs propres de $H_D(h)$ se positionnent sur les énergies résonantes et sont donc à distance uniformément minorée par h du contour γ , l'écart entre deux énergies résonantes étant indépendant de $h > 0$.

2. Pour ces z les estimations de résolvante en termes de distance d'Agmon sont toutes valables à l'énergie λ_l (car $\lambda(h) \rightarrow \lambda_l$ et on a la propriété de monotonie de la distance par rapport à l'énergie, cf. (8.2.8) p. 92).

On obtient

$$(1 - \Pi_D(h))\chi_i\psi_i = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma} (\mu_i(h) - z)^{-1} (z - H_D(h))^{-1} [P(h), \chi_i]\psi_i dz. \quad (13.6.8)$$

Il suffit ensuite d'avoir une estimation de $r_i := [P(h), \chi_i]\psi_i$, et d'utiliser les estimations de la résolvante : on remarque pour cela que la fonction r_i est localisée dans la réunion de 2η -voisinages des c_k , (et donc disjoints, η étant petit) pour $k \neq i$. En outre, on sait que ψ_i (et sa dérivée) est $\mathcal{O}_{\eta}(e^{-d(x, c_i)})$ (théorème 11.4 p. 120). Soit alors $x \in \text{supp } r_i$, et soit $c_{k(x)}$ le centre de la boule dans laquelle se trouve x . Alors pour tout y dans cette boule :

$$\begin{aligned} d(x; c_i) &= d(x, y) + d(y; c_i) + \mathcal{O}(\eta) \\ &= d(x, c_{k(x)}) + d(c_{k(x)}; c_i) + \mathcal{O}(\eta) \\ &\geq \inf_{k \neq i} d(x, c_k) + d(c_k; c_i) - \mathcal{O}(\eta), \end{aligned}$$

la dernière égalité découlant du fait que si x varie dans le support de r_i , $k(x)$ parcourt les indices $k \neq i$. Ainsi on a

$$\forall x \in I, \quad |r_i(x)| \leq C_{\eta} e^{-\delta_i(x)/h + c\eta/h}, \quad \delta_i(x) := \inf_{k \neq i} d(x, c_k) + d(c_k, c_i). \quad (13.6.9)$$

Remarquer que $\delta_i(x)$ s'interprète comme la longueur du plus court chemin de x aux puits c_i en passant par un autre puits c_k . En particulier on a toujours

$$\forall x \in I, \quad \forall i \in J(\lambda), \quad \delta_i(x) \geq d(x, c_i) \quad (13.6.10)$$

On obtient à l'aide du théorème précédent sur la décroissance du noyau et (13.6.8)

$$\begin{aligned} \forall x \in I, \quad |(1 - \Pi_D(h))\chi_i\psi_i(x)| &\leq \frac{1}{2\pi h} C_{\eta} e^{c\eta/h} e^{-\inf_{k \neq i} d(x; y)/h} |r_i(y)| \\ &\lesssim_{\eta} e^{-\inf_{k \neq i} (d(x, c_k) + \delta_i(c_k))/h}. \end{aligned} \quad (13.6.11)$$

Fixons $k \neq i$. Alors par définition

$$\begin{aligned} \forall k' \neq i \quad \delta_i(x) &\leq d(x, c_{k'}) + d(c_{k'}; c_i) \\ &\leq d(x, c_k) + d(c_k; c_{k'}) + d(c_{k'}; c_i) \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} \forall k' \neq i \quad \delta_i(x) - d(x, c_k) &\leq +d(c_k; c_{k'}) + d(c_{k'}; c_i) \\ &\leq \inf_{k' \neq i} d(c_k; c_{k'}) + d(c_{k'}; c_i) \end{aligned}$$

et par suite, puisque le membre de droite n'est autre que $\delta_i(c_k)$, et que $k \neq i$ est quelconque

$$\forall k \neq i \quad \delta_i(x) \leq d(x, c_k) + \delta_i(c_k),$$

et finalement (13.6.11) devient :

$$\forall x \in I, \quad |(1 - \Pi_D(h))\chi_i\psi_i(x)| \leq \frac{1}{2\pi h} C_\eta e^{c'\eta/h} e^{-\delta_i(x)/h} \lesssim_\eta e^{-\delta_i(x)/h}. \quad (13.6.12)$$

On conclut alors en notant que $\Pi_D(h)\chi_i\psi_i = \chi_i\psi_i - (1 - \Pi_D(h))\chi_i\psi_i$, les estimations de décroissance de $\chi_i\psi_i$, et (13.6.10). ■

Partie V
**Asymptotique de la densité
d'états locale**

Problème des puits bouchés

La méthode destinée à calculer le prolongement méromorphe de la résolvante consiste en une approche perturbative formalisée de façon adaptée dans le cadre d'un problème de Grushin. Elle se fait en construisant par approximations successives la résolvante. Le point de départ est assez intuitif, et est semblable dans la méthode au point de départ de la section 14.6 : si l'on pense aux résonances comme valeurs propres perturbées d'un problème de Dirichlet, il est naturel, pour une énergie fixée, de remplacer le problème initial par le problème de Dirichlet avec les puits résonants. En dehors des puits résonants, on peut remplacer le potentiel par le potentiel où l'on a bouché les puits résonants. On étudie dans ce chapitre le problème avec conditions résonantes avec puits (partiellement) bouché. On y recourt abondamment aux méthodes d'énergie (présentées au chapitre 9).

14.1 Existence de la résolvante pour le problème avec puits complètement bouché

Ici, on étudie le problème linéaire introduit dans le chapitre 1.

Dans le but de calculer le prolongement méromorphe de la résolvante, on se concentre sur les z autour de l'axe réel.

■ **14.1. Notation.** On définit l'ensemble

$$\Omega(\varepsilon_0; h) := \{z \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Re} z \in [\Lambda_* - \varepsilon_0; \Lambda^* + \varepsilon_0], \quad |\operatorname{Im} z| \leq h\},$$

où $\varepsilon_0 \in [0; \Lambda_0 - \Lambda^* \cap [0; \Lambda_*[$, est un paramètre donné. On notera également :

$$\mathcal{I}(\varepsilon_0) := \Omega(\varepsilon_0; h) \cap \mathbb{R}.$$

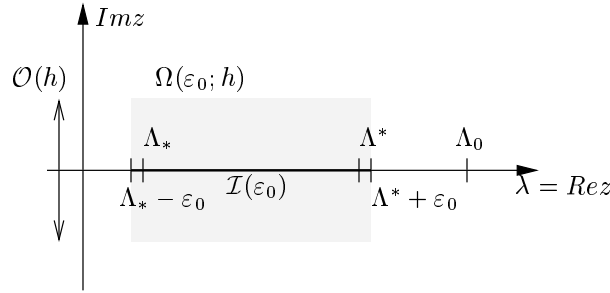


FIG. 14.1 – Dans $\Omega(\varepsilon_0; h)$, $\tilde{H}(z; h) - z$ est inversible.

On montre

■ **14.2. Proposition.** *La résolvante $[\tilde{H}(\zeta; h) - z]^{-1}$ est bien définie pour tout ζ dans $\Omega(\varepsilon_0; h)$, et est de plus est uniformément bornée en $z, \zeta \in \Omega(\varepsilon_0; h)$.*

Preuve. On s'intéresse par définition de $\tilde{H}(\zeta, h)$ au problème aux limites :

$$\begin{cases} -h^2 u'' + (\tilde{\mathcal{V}}^h - z)u = f, & f \in L^2(]a, b[), \quad \zeta \in \Omega(\varepsilon_0; h), \\ \frac{h}{i} u' = \sqrt{\zeta + B} u & x = b \\ \frac{h}{i} u' = -\sqrt{\zeta} u & x = a. \end{cases} \quad (14.1.1)$$

On applique le théorème de Lax-Milgram : multipliant l'équation ci-dessus par \bar{u}_2 après avoir changé u en u_1 , on obtient par le lemme 8.1 p. 87 la forme bilinéaire sous-jacente (faire $\varphi = 0$ et utiliser les conditions au bord), à savoir

$$\begin{aligned} A(u_1, u_2) &:= \int_a^b h u_1' h u_2' dx + \int_a^b (\tilde{\mathcal{V}}^h - z - \varphi'^2) u_1 \bar{u}_2 dx \\ &\quad - i h \sqrt{\zeta} u_1(a) \bar{u}_2(a) + i h \sqrt{\zeta + B} u_1(b) \bar{u}_2(b). \end{aligned} \quad (14.1.2)$$

Cette forme est manifestement continue sur $H^1 \times H^1$ d'après la continuité sur H^1 de la forme linéaire $u \mapsto u(p)$ pour $p \in I$. Précisons la dépendance en norme $H^{1,h}$: on écrit que

$$|u|^2(x) = |u|^2(p) + \int_p^x 2 \operatorname{Re}(u'(t) \bar{u}(t)) dt,$$

puis $|u|^2(p) \leq |u|^2(x) + 2|u|_{L^2} |u'|_{L^2}$, et en intégrant sur $]a, b[$, il suit

$$(b-a)|u|^2(p) \leq |u|_{L^2}^2 + 2(b-a)|u|_{L^2}|u'|_{L^2},$$

d'où

$$|u|^2(p) \leq |u|_{L^2} \left(\frac{|u|_{L^2}}{b-a} + \frac{2}{h}|hu'|_{L^2} \right).$$

Cela donne donc pour h suffisamment petit

$$|u|^2(p) \leq \frac{2}{h}|u|_{L^2}|u|_{1,h}.$$

Reste à voir que la forme A est coercive. Comme

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(A(u, u)) &= \int_a^b (hu')^2 dx + \int_a^b (\tilde{\mathcal{V}}^h - \operatorname{Re}(z))|u|^2 dx \\ &+ h \operatorname{Im} \left(\sqrt{\zeta}|u_1(a)|^2 - \sqrt{\zeta + B}|u(b)|^2 \right), \end{aligned}$$

on obtient en remarquant que

$$\tilde{\mathcal{V}}^h \geq \Lambda_0 \quad \text{et} \quad \operatorname{Re}(z) \leq \Lambda^* + \varepsilon_0,$$

et en utilisant pour $p \in \{a, b\}$ l'estimation de $|u(p)|^2$ précédente :

$$\operatorname{Re}(A(u, u)) \geq |hu'|_{L^2}^2 + \int_a^b (\Lambda_0 - \Lambda^* - \varepsilon_0)|u|^2 dx + \mathcal{O}(h^{1/2})|u|_{1,h},$$

et par hypothèse sur Λ^* , la forme A est bien coercive.

On déduit par le théorème de Lax-Milgram qu'il existe un unique u dans $H^1([a, b])$ tel qu'on ait pour tout v dans $H^1([a, b])$, $A(u, v) = \langle f, v \rangle_{L^2}$. La théorie des distributions fait ensuite le pont avec le problème d'EDP sous-jacent (très classique) : si $v \in C_0^\infty([a, b])$, la formulation variationnelle dit que u vérifie au sens des distributions l'équation

$$-h^2 u'' + (\tilde{\mathcal{V}}^h - z)u = f, \quad x \in]a; b[.$$

Comme $u \in H^1([a, b])$, et $u'' = (\tilde{\mathcal{V}}^h - z)u/h^2 - f/h^2 \in L^2$, on en déduit que u est dans $H^2([a, b])$. En particulier $u \in C^1([a, b])$. Maintenant si on prend v dans $H^1([a, b])$, on voit par une intégration par parties, puisque $A(u, v) = \langle f, v \rangle$, que

$$\sqrt{\zeta + B}u(b)\bar{v}(b) + \sqrt{\zeta}u(a)\bar{v}(a) = \frac{h}{i}(u'(b)\bar{v}(b) - u'(a)\bar{v}(a)),$$

ou encore que pour tout v dans $H^1([a, b])$

$$\bar{v}(b) \left[\sqrt{\zeta + B}u(b) - \frac{h}{i}u'(b) \right] + \bar{v}(a) \left[\sqrt{\zeta}u(a) + \frac{h}{i}u'(a) \right] = 0.$$

Comme $v(a)$ et $v(b)$ sont des complexes quelconques, u vérifie les conditions aux limites et u est bien solution du problème (14.1.1). ■

14.2 Estimation pondérée de la résolvante

On énonce :

■ **14.3. Proposition.** Soit $z \in \Omega(\varepsilon_0; h)$. Il existe une constante C indépendante de ζ dans $\Omega(\varepsilon_0; h)^2$ telle que pour $h > 0$ assez petit, et pour toute fonction f dans $L^2([a, b])$:

$$|e^{\frac{\varphi}{h}} (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} f|_{2,h} \leq C |e^{\frac{\varphi}{h}} f|_{L^2},$$

φ étant une fonction réelle de classe C^1 par morceaux telle que

$$\forall h > 0, \quad \inf_{[a,b]} (\tilde{\mathcal{V}}^h - \operatorname{Re}(z) - \varphi'^2) \geq c > 0. \quad (14.2.1)$$

14.4. Remarque. Ce genre d'estimations à poids fournit le même type de résultats de décroissance du noyau de cette résolvante que pour le problème de Dirichlet, puisque si f est à support compact dans un petit voisinage de diamètre ε d'un point $y_0 \in I$, la fonction $\varphi := (1 - \varepsilon)d(x, y_0; \tilde{V}^h; \operatorname{Re}(z))$ satisfait l'hypothèse 14.2.1. On tire alors des injections de Sobolev l'estimation ponctuelle

$$\left[(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} f \right] (x) = \mathcal{O}_\varepsilon \left(f(y_0) e^{-(d(x; y_0) + \varepsilon)/h} \right).$$

Preuve. Il suffit d'introduire $v := e^{\varphi/h} u$, où u est solution du problème (14.1.1) et d'écrire le problème vérifié par v , que l'on reformule de façon variationnelle ; appliquant le lemme 8.1 avec $V = \tilde{\mathcal{V}}^h$ on obtient, avec $u_1 = u$, et u_2 quelconque dans $H^1(I)$:

$$\begin{aligned} \int_a^b e^{\varphi/h} f e^{\varphi/h} \bar{u}_2 dx &= \int_a^b h (e^{\varphi/h} u_1)' h (e^{\varphi/h} \bar{u}_2)' dx \\ &+ \int_a^b (\tilde{\mathcal{V}}^h - z - \varphi'^2) (e^{\varphi/h} u_1) (e^{\varphi/h} \bar{u}_2) dx \\ &+ h \int_a^b \varphi' \left((e^{\varphi/h} u_1)' (e^{\varphi/h} \bar{u}_2) - (e^{\varphi/h} u_1) (e^{\varphi/h} \bar{u}_2)' \right) dx \\ &- ih \left(e^{2\varphi(a)/h} i \sqrt{\zeta} u_1(a) \bar{u}_2(a) - e^{2\varphi(b)/h} \sqrt{\zeta + B} u_1(b) \bar{u}_2(b) \right), \end{aligned}$$

ce qui conduit à considérer la forme

$$\begin{aligned} A(v_1, v_2) &:= \int_a^b h v_1' h \bar{v}_2' dx + \int_a^b (\tilde{\mathcal{V}}^h - z - \varphi'^2) v_1 \bar{v}_2 + h \int_a^b \varphi' (v_1' \bar{v}_2 - v_1 \bar{v}_2') dx \\ &- ih \sqrt{\zeta} v_1(a) \bar{v}_2(a) + ih \sqrt{\zeta + B} v_1(b) \bar{v}_2(b), \end{aligned}$$

qui est bien continue, et coercive puisque

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} A(v, v) &= \int_a^b h v_1' h \bar{v}_2' dx + \int_a^b (\tilde{\mathcal{V}}^h - \operatorname{Re} z - \varphi'^2) v_1 \bar{v}_2 dx \\ &+ h \operatorname{Im} \left(\sqrt{\zeta} \right) |v_1(a)|^2 - h \operatorname{Im} \left(\sqrt{\zeta + B} \right) |v_1(b)|^2, \end{aligned}$$

et que l'hypothèse sur φ permet de conclure comme dans la preuve de la proposition précédente. Appliquant le théorème de Lax-Milgram et revenant à l'équation différentielle, on obtient la proposition après avoir remarqué que les estimations sont uniformes en $z, \zeta \in \Omega(\varepsilon_0; h)$. ■

14.2.1 Densité d'états locale pour le puits bouché

Terminons cette section par un résultat de décroissance des fonctions propres généralisées $\tilde{\psi}_-(k, \cdot)$ dans I pour le hamiltonien

$$\tilde{H}(h) = H(h) + W^h.$$

Sur le calcul explicite du potentiel constant sur I fait dans la section 10.3 p. 105, on a constaté que sur l'île $\tilde{\psi}_-(k, \cdot)$ a le comportement d'une onde plane exponentiellement amortie au taux de la distance d'Agmon au point d'entrée de l'île à l'énergie $\lambda(k)$ (prop. 10.12). Rappelons que $\lambda(k)$ est déterminé par la relation de dispersion :

$$\lambda(k) = k^2, \quad k > 0, \quad \text{et} \quad \lambda(k) = k^2 - B, \quad k < 0, \quad k \neq -B.$$

Le résultat de décroissance des fonctions $\tilde{\psi}_-(k, \cdot)$ est alors le suivant :

■ **14.5. Proposition.** *Soit $k \in \mathbb{R}$ tel que $\lambda(k) \in [\Lambda_*; \Lambda^*]$. Notons \tilde{d} la distance d'Agmon pour l'énergie $\lambda(k)$ et le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h$:*

$$\forall x, y \in I, \quad \tilde{d}(x, y) := \left| \int_x^y \sqrt{\tilde{\mathcal{V}}^h(t) - \lambda(k)} dt \right|.$$

Alors, uniformément en $x \in I$ et $k \in \lambda^{-1}([\Lambda_; \Lambda^*])$ $|\tilde{\psi}_-(k, x)|$ est borné. De plus, on a les estimations ponctuelles suivantes :*

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_-(k, x) &= \mathcal{O}(h^{-1/2} e^{-\tilde{d}(a, x)/h}) \quad \text{si } k > 0 \\ \tilde{\psi}_-(k, x) &= \mathcal{O}(h^{-1/2} e^{-\tilde{d}(b, x)/h}) \quad \text{si } k < 0. \end{aligned}$$

Preuve. Il s'agit d'utiliser des estimations d'Agmon. Faisons la preuve pour $k > 0$, celle-ci étant la même pour $k < 0$ en échangeant les rôles de a et b . Commençons par le

■ **14.6. Lemme.** Pour $k > 0$ (resp. $k < 0$) tel que $\lambda(k) \in [\Lambda_*; \Lambda^*]$, la fonction la fonction $A_k : x \mapsto |\tilde{\psi}_-(k, x)|^2$ est convexe et décroissante (resp. croissante) sur I . De plus, $\tilde{\psi}_-$ est uniformément bornée sur I lorsque $h \rightarrow 0$.

Preuve. On fait également la preuve pour $k > 0$ seulement. Un calcul direct donne pour tout $x \in I$, puisque la fonction A_k est C^2 sur I :

$$\begin{aligned} h \frac{d}{dx} |\tilde{\psi}_-(k, x)|^2 &= 2 \operatorname{Re} \left(\tilde{\psi}_-(k, x) \overline{h \tilde{\psi}'_-(k, x)} \right) \\ h^2 \frac{d^2}{dx^2} |\tilde{\psi}_-(k, x)|^2 &= 2 |h \tilde{\psi}'_-(k, x)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left(\tilde{\psi}_-(k, x) \overline{h^2 \tilde{\psi}''_-(k, x)} \right), \end{aligned}$$

et en utilisant l'équation différentielle vérifiée sur I on obtient

$$h^2 \frac{d^2}{dx^2} |\tilde{\psi}_-(k, x)|^2 = 2 |h \tilde{\psi}'_-(k, x)|^2 + 2 (\tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(k)) |\tilde{\psi}_-(k, x)|^2 \geq 0. \quad (14.2.2)$$

Ainsi la fonction $hA'_k : x \mapsto h d/dx |\tilde{\psi}_-(k, x)|^2$ est croissante sur I . On remarque alors qu'en $x = b$, (rappelons que $k > 0$) on a

$$hA'_k(b) = 2 \operatorname{Re} \left(\tilde{\psi}_-(k, b) \overline{h \tilde{\psi}'_-(k, b)} \right) = 2 \operatorname{Re} \left(2ik |\tilde{\psi}_-(k, b)|^2 \right) = 0. \quad (14.2.3)$$

Et finalement, l'amplitude de l'onde est décroissante. Enfin, on a

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}_-(k, a)|^2 &= |e^{ika/h} + \rho_k e^{-ika/h}|^2 \\ &= 1 + |\rho_k|^2 + 2 \operatorname{Re}(\rho_k e^{2ika/h}) \\ &\leq |1 + \rho_k|^2. \end{aligned}$$

Or, on dispose de la relation (6.1.1) p. 62

$$|\rho_k|^2 + \frac{\sqrt{\lambda(k)}}{\sqrt{\lambda(k)} + B} |\tau_k|^2 = 1, \quad (14.2.4)$$

et par suite $|\rho_k|^2 \leq \sqrt{1 + \frac{B}{\lambda(k)}}$. ■

Pour en venir à la preuve de la proposition : appliquons le lemme 8.1 p. 87 avec

$$V = \tilde{\mathcal{V}}^h, \quad z = \lambda(k) \in \mathbb{R}, \quad u = v = \tilde{\psi}_-(k, \cdot), \quad \varphi(x) = \tilde{d}(a; x)$$

(si $k < 0$, prendre $\tilde{d}(x; b)$). Noter que l'on a $\tilde{\mathcal{V}}^h(x) - \lambda(k) > 0$ sur I , si bien que φ ainsi définie est de classe C^1 sur I . On a ensuite

$$V - \varphi'^2 - z = 0$$

et aussi

$$\tilde{P}(h)u = 0.$$

Ainsi, en prenant les parties réelles :

$$\begin{aligned} |h(e^{\frac{\varphi}{h}} \tilde{\psi}_-(k, \cdot))'|_{L^2}^2 &\leq h^2 e^{2\varphi(a)/h} \left| \operatorname{Re} [\tilde{\psi}'_-(k, a) \overline{\tilde{\psi}_-(k, a)}] \right| \\ &+ h^2 e^{2\varphi(b)/h} \left| \operatorname{Re} [\tilde{\psi}'_-(k, b) \overline{\tilde{\psi}_-(k, b)}] \right|. \end{aligned}$$

À cause des conditions au bord vérifiées par $\tilde{\psi}_-(k, \cdot)$, on a, pour $h \rightarrow 0$

$$h\tilde{\psi}'_-(k, b) \overline{\tilde{\psi}_-(k, b)} = 2ik|\tilde{\psi}_-(k, b)|^2 \notin \mathbb{R}, \quad \text{et} \quad \tilde{\psi}_-(k, a), h\tilde{\psi}'_-(k, a) = \mathcal{O}(1),$$

si bien que l'inégalité précédente devient, puisque $\varphi(a) = 0$,

$$\|e^{\tilde{d}(a; \cdot)/h} \tilde{\psi}_-(k, \cdot)\|_{H_0^{1,h}(a;b)}^2 = \mathcal{O}(h).$$

Sachant que $|\tilde{\psi}_-|$ est bornée avec le lemme précédent, cela suffit à obtenir des estimations ponctuelles, puisque

$$e^{\tilde{d}(a;x)/h} \tilde{\psi}_-(k, x) = \tilde{\psi}_-(k, a) + h^{-1} \int_a^x h(e^{\frac{\varphi}{h}} \tilde{\psi}_-(k, \cdot))' dt,$$

et par suite, pour tout $x \in I$ (appliquer l'inégalité de Cauchy-Schwarz)

$$|e^{\tilde{d}(a;x)/h} \tilde{\psi}_-(k, x)|^2 \leq 2|\tilde{\psi}_-(k, a)|^2 + 2h^{-2}(b-a) \|e^{\tilde{d}(a; \cdot)/h} \tilde{\psi}_-(k, \cdot)\|_{H_0^{1,h}(a;b)}^2.$$

■

14.7. Remarque.

1. Le résultat du lemme est donc sensiblement amélioré par les estimations d'Agmon. On peut d'ailleurs remarquer que taux de décroissance obtenu n'est pas optimal, comme le montre le cas du potentiel \tilde{V}^h constant.
2. On obtient toutefois en sous-produit de cette estimation assez grossière (elle sera améliorée dans la proposition 18.39 p.257) que

$$|\tilde{\psi}_-(k, b)| = |\tau_k| = \mathcal{O}(h^{-1/2} e^{-\tilde{d}(a,b)/h}).$$

Comme $\tau_k \neq 0$, sinon quoi $\tilde{\psi}_-$ serait nulle, on déduit par (14.2.4) que

$$\forall h > 0, \quad |\rho_k| < 1, \quad \text{et} \quad |\rho_k| = 1 + \mathcal{O}(h^{-1/2} e^{-\tilde{d}(a,b)/h}). \quad (14.2.5)$$

3. La présence du puits quantique, qui du point de vue spectral introduit des pôles pour la résolvante, amplifie pour des valeurs exceptionnelles de $\lambda(k)$ l'état de diffusion $\psi(k, \cdot)$ au voisinage du puits. C'est ce qui avait déjà été abordé avec l'opérateur $\mathbb{T}(\lambda(k))$ (points 6. et 8. de la remarque p. 73).

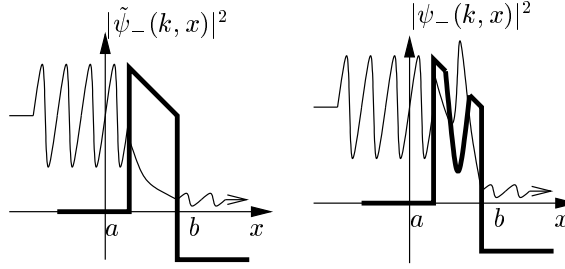


Figure 14.2. Amortissement des états de diffusion ($k > 0$) : lorsque le puits est bouché, l'onde est amortie. La présence du puits amplifie l'onde pour les k tels que $\lambda(k)$ est proche d'une résonance.

On peut enfin donner en corollaire le résultat correspondant pour la densité d'états locale :

■ **14.8. Corollaire.** Soit $\theta \in C_c^0(\Lambda_*; \Lambda^*)$, et $K \subset [a; b]$ intervalle compact. Alors, pour toute fonction $\varphi \in C_c^0(K)$ positive, l'opérateur $\theta(\tilde{H}(h))\varphi$ est à trace et on a l'estimation :

$$\|\theta(\tilde{H}(h))\varphi\|_{\mathcal{L}^1} = \mathcal{O}(e^{-d_*(\partial I, \partial K)/h}) \|\theta\|_\infty \|\varphi\|_\infty, \quad h \rightarrow 0,$$

d_* désignant la distance d'Agmon à l'énergie Λ_* pour le potentiel constant égal à Λ_0 . En particulier, la famille de mesures $(dn_\theta[\tilde{H}(h)])_{h>0}$ est bornée et converge faiblement, à extraction près, vers une mesure positive atomique chargeant le bord de l'île ∂I .

Preuve. Il suffit de reprendre le calcul du cas de la barrière de potentiel et d'utiliser les approximations des fonctions $\tilde{\psi}_-$ de la proposition précédente en prenant $\eta := \tilde{d}(\partial I, \partial K) > 0$. Ainsi les termes résiduels dans la proposition (14.5) deviennent $\mathcal{O}(e^{-\tilde{d}(\partial I, \partial K)/h})$. On utilise enfin le fait que $\tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(k) \geq \Lambda_0 - \Lambda^*$ pour remplacer \tilde{d} par d_* . ■

14.3 Problème des puits partiellement bouchés

14.3.1 Existence de la résolvante

Ici, on se place de nouveau dans un problème multipuits et on fixe une énergie résonante λ . On veut prouver que l'opérateur avec conditions résonantes sur I pour lequel le potentiel est égal au potentiel total auquel on a bouché les puits résonants est inversible sur $[\lambda - \varepsilon; \lambda + \varepsilon] \times [-h; h]$, ε indépendant de h . Ceci n'est pas direct puisque des estimations d'énergie du type Agmon ne donneraient rien dans les régions non-elliptiques.

■ **14.9. Notation.** On fixe $\lambda_l \in \mathcal{E}_{\text{rés}}$ une énergie résonante pour $H_D(h)$. On pose

$$W_{NR}^h := W^h - \sum_{i \in J(\lambda)} w_i(\cdot - c_i/h), \quad W_R^h := W^h - W_{NR}^h.$$

Enfin on posera

$$U_{NR}^h := \text{supp } W_{NR}^h, \quad U_R^h := \text{supp } W_R^h.$$

Rappelons que ces énergies sont en nombre fini et qu'à la limite $h \rightarrow 0$, les valeurs propres de $H_D(h)$ se positionnent sur ces énergies (théorème 13.19 p.146).

■ **14.10. Définition.** On considère l'opérateur non borné fermé $H_{NR}(\zeta; h)$ du problème au puits partiellement bouché défini par

$$H_{NR}(\zeta; h) := \tilde{H}(\zeta; h) - W_{NR}^h = H(\zeta; h) + W_R^h.$$

14.11. Remarque. La définition de l'opérateur avec puits partiellement bouché dépend de l'énergie considérée.

On introduit ensuite le problème de Dirichlet pour lequel on a bouché les puits résonants également :

■ **14.12. Définition.** Soit $H_D^{NR}(h)$ la réalisation de Dirichlet de l'opérateur $p^{NR}(h) := -h^2 d^2/dx^2 + \tilde{\mathcal{V}}^h - W_{NR}^h$ sur I :

$$H_D^{NR}(h) = H_D(h) + W_R^h.$$

Par définition des énergies résonantes pour $H_D(h)$, il est clair que l'ensemble des énergies résonantes pour $H_D(h)$ dans $[\Lambda_*; \Lambda^*]$ est précisément $\mathcal{E}_{\text{rés}} \setminus \bigcup_{i \in J(\lambda_i)} \mathcal{E}_i$. L'application du théorème 13.19 et la proposition 13.21 à ce hamiltonien donne la

■ **14.13. Proposition.** Pour $\lambda \in [\lambda_l - 2\varepsilon_{l-1}; \lambda_l + 2\varepsilon_l]$, l'opérateur $H_D^{NR}(h)$ est inversible. De plus, il existe une fonction $\alpha(h) \geq h$ tendant vers 0, telle que pour $h > 0$ assez petit, $H_D^{NR}(h)$ ne possède pas de spectre sur l'intervalle $\Lambda_l(h) = [\lambda_{l-1} + \alpha(h); \lambda_l + \alpha(h)]$, et telle que pour $z \in \Omega(\varepsilon_0; h)$,

$$\text{Re } z \in \Lambda_l(h) \Rightarrow \text{dist}(z, \sigma(H_D^{NR}(h))) \geq h.$$

Enfin, pour $\eta > 0$ assez petit, et pour tous x_0, y_0 dans $I =]a; b[$, on a en norme d'opérateur

$$\|\chi_{x_0}(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\chi_{y_0}\| \lesssim_\eta e^{-d(x_0; y_0)/h},$$

d désignant la distance d'Agmon pour le potentiel $\tilde{V}^h - W^h$ à l'énergie λ_l . L'estimation subsiste pour $\operatorname{Re}(z) \in [\lambda_l + \alpha(h); \lambda_l + 2\varepsilon_l]$ à condition de remplacer l'énergie λ_l par l'énergie λ_{l+1} .

Preuve. On sait que les valeurs propres de $H_D^{NR}(h)$, en nombre fini autour de $[\Lambda_*; \Lambda^*]$, se positionnent à la limite sur les $\lambda \in \mathcal{E}_{rs} \setminus \cup_{i \in J(\lambda_l)} \mathcal{E}_i$. En particulier $\lambda - l$ n'est pas une énergie limite. Il existe donc une fonction $\alpha(h)$ tendant vers zéro telle que pour h assez petit, le spectre de $H_D^{NR}(h)$ autour de $[\Lambda_*; \Lambda^*]$ est contenu dans la réunion des boules de rayon $\alpha(h)$, et centrées sur les λ_k , $k \neq l$. Quitte à augmenter $\alpha(h)$ en le remplaçant par h , on peut alors supposer que $\alpha(h) \geq h$, ce qui donne l'implication de la proposition. Quant à l'estimation de la norme d'opérateur, il suffit d'appliquer la proposition 13.21, le facteur h^{-1} étant absorbé dans les estimations \lesssim_η . On peut ensuite remplacer l'énergie $\operatorname{Re} z$ par l'énergie $\lambda_l + \alpha(h)$ en utilisant la décroissance de la distance d'Agmon par rapport à l'énergie (8.2.8 p.92). On peut enfin remplacer cette énergie par λ_l puisque $\alpha(h) \rightarrow 0$. ■

On établit alors l'inversibilité de l'opérateur $H^{NR}(\zeta; h)$, en suivant toujours la même idée : hors des puits résonants on est ramené au problème du puits complètement bouché qui est inversible, tandis qu'autour des puits non-résonants on peut approcher l'opérateur par le problème de Dirichlet.

■ **14.14. Notation.** On pose

$$S_{NR} := d(\operatorname{supp} W_{NR}^h; \partial I)$$

d désignant la distance d'Agmon pour le potentiel $\tilde{V}^h - W^h$ à l'énergie λ_{l+1} .

■ **14.15. Notation.**

On introduit pour $\eta > 0$ petit fixé deux fonctions plateau χ et $\tilde{\psi}$ supportées dans I (voir figure 14.3.1) telles que

$$\begin{aligned} \chi &\in C_c^\infty(I), \quad 0 \leq \chi \leq 1, \quad \chi \equiv 1 \text{ dans } \mathcal{B}(U_{NR}^h; S_{NR} - \eta), \\ \tilde{\psi} &\in C_c^\infty(I), \quad 0 \leq \tilde{\psi} \leq 1, \quad \tilde{\psi} \equiv 1 \text{ dans } \mathcal{B}(U_{NR}^h; \frac{S_{NR} - \eta}{2}), \\ &\quad \tilde{\psi} \equiv 0 \text{ dans } \mathcal{B}^c(U_{NR}^h; \frac{S_{NR} + \eta}{2}). \end{aligned}$$

■ **14.16. Proposition.** Pour $\zeta \in \Omega(\varepsilon_0; h)$ tel que $\operatorname{Re}(z) \in [\lambda_l - 2\varepsilon_{l-1}; \lambda_l + 2\varepsilon_l]$ l'opérateur $(H_{NR}(\zeta; h) - z)$ est inversible. En outre la norme de l'inverse est uniformément bornée pour ces z , $h \rightarrow 0$.

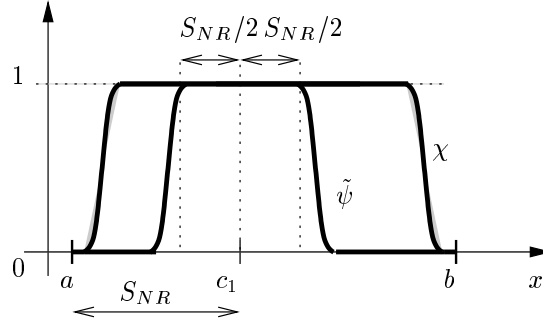


Figure 14.3. Supports des fonctions χ et $\tilde{\psi}$.

Preuve. On pose comme inverse approché à droite

$$R := (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \tilde{\psi}) + \chi(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\tilde{\psi}. \quad (14.3.1)$$

Un calcul direct donne

$$\begin{aligned} (H^{NR}(\zeta; h) - z)R &= (\tilde{H}(\zeta; h) - z - W_{NR}^h)(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \tilde{\psi}) \\ &\quad + (H_{NR}(\zeta; h) - z)\chi(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\tilde{\psi} \end{aligned} \quad (14.3.2)$$

$$\begin{aligned} &= 1 - \tilde{\psi} - W_{NR}^h(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \tilde{\psi}) \\ &\quad + (H_D^{NR}(h) - z)\chi(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\tilde{\psi} \end{aligned} \quad (14.3.3)$$

$$\begin{aligned} &= 1 - \tilde{\psi} - W_{NR}^h(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \tilde{\psi}) + \chi\tilde{\psi} \\ &\quad + [p(h), \chi](H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\tilde{\psi} \end{aligned} \quad (14.3.4)$$

$$\begin{aligned} &= 1 - W_{NR}^h(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \tilde{\psi}) \\ &\quad + [p(h), \chi](H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\tilde{\psi}, \end{aligned} \quad (14.3.5)$$

où on a utilisé successivement que $(H_{NR}(\zeta; h) - z)\chi = (H_D^{NR}(h) - z)\chi$ et que $\chi\tilde{\psi} = \tilde{\psi}$.

Avec les estimations sur les résolvantes $(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}$ et $(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}$, dont le spectre se concentre pour $h \rightarrow 0$ vers les énergies résonantes distinctes de λ , si bien que z est uniformément loin du spectre de $H_D^{NR}(h)$, on trouve que les deux derniers termes de (14.3.5) sont en norme d'opérateur $\mathcal{O}_\eta(e^{-(S_{NR}-c\eta)/2h})$, ce qui montre que pour h assez petit, uniformément en z et ζ , $(H_{NR}(\zeta; h) - z)$ est surjectif.

Construisons ensuite un inverse à gauche. Similairement, on pose

$$L := (1 - \tilde{\psi})(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} + \tilde{\psi}(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}. \quad (14.3.6)$$

En calculant directement de la même façon que pour R , on obtient (décomposer χ en $[1 + \chi - 1]$)

$$\begin{aligned}
L(H_{NR}(\zeta; h) - z) &= 1 - \tilde{\psi} - (1 - \tilde{\psi})(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}W_{NR}^h \\
&\quad + \tilde{\psi}\chi - \tilde{\psi}(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}[p(h), \chi] \\
&\quad + \tilde{\psi}(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}(1 - \chi)(H_{NR}(\zeta; h) - z) \\
&\quad - 1 - \tilde{\psi}(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}[p(h), \chi] \\
&\quad + \tilde{\psi}(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}(1 - \chi)(H_{NR}(\zeta; h) - z).
\end{aligned} \tag{14.3.7}$$

Encore avec les estimations de résolvante pour Dirichlet et puits bouché ($H_D^{NR}(h) - z$) est un opérateur borné, on aboutit à :

$$L(H_{NR}(\zeta; h) - z) = 1 + \mathcal{O}_\eta(e^{-(S_{NR} - c\eta)/2h}). \tag{14.3.8}$$

On en déduit que $(H_{NR}(\zeta; h) - z)$ est aussi injectif, il est donc bijectif et son inverse est donné, en reprenant (14.3.5) par

$$(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} = R \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n, \tag{14.3.9}$$

où on a posé

$$\varepsilon := W_{NR}^h(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} - (1 - \tilde{\psi})[p(h), \chi](H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\tilde{\psi} \tag{14.3.10}$$

14.3.2 Estimation sur la résolvante

Comme dans la notation 12.12 p.135, on fixe, pour $\eta > 0$ fixé mais petit une fonction $\tilde{\chi}$ plateau valant 1 sur $[-\eta/2; \eta/2]$ et nulle en dehors de $[-\eta; \eta]$ et pour un point p dans $]a; b[$ on notera $\tilde{\chi}_p := \tilde{\chi}(\cdot - p)$.

■ **14.17. Proposition.** Pour, x_0 et y_0 dans $]a; b[$ l'opérateur

$\tilde{\chi}_{x_0}(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}\tilde{\chi}_{y_0}$ vérifie l'estimation

$$\|\tilde{\chi}_{x_0}(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}\tilde{\chi}_{y_0}\| \lesssim_\eta e^{-d(x_0, y_0)/h}$$

uniformément en $\zeta \in \Omega(\varepsilon_0; h)$ et $Re z$ dans $\Lambda_l(h)$, d désignant la distance d'Agmon pour le potentiel $\tilde{V}^h - W^h$ à l'énergie λ_l .

14.18. Remarque. Comme dans le cas de la proposition 14.13, l'estimation est valide également si $Re z \in \Lambda_{l+1}(h)$ à condition de remplacer l'énergie λ_l par l'énergie λ_{l+1} dans la distance d , ceci toujours par monotonie de la distance d'Agmon par rapport à l'énergie.

Preuve. Estimons chaque terme de la somme dans (14.3.9), en commençant par $n = 1$, puisqu'il est clair que

$$\forall x_0, y_0 \in I, \quad \text{L'opérateur } \tilde{\chi}_{x_0} R \tilde{\chi}_{y_0} \text{ est } \mathcal{O}_\eta(e^{-(d(x_0, y_0) - c\eta)/h}). \quad (14.3.11)$$

Un calcul direct, utilisant que $(1 - \tilde{\psi})W_{NR}^h = 0$, et $\tilde{\psi}[p(h), \chi] = 0$ donne :

$$\begin{aligned} R\varepsilon &= -(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}[p(h), \chi](H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\tilde{\psi} \\ &\quad + \chi(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}W_{NR}^h(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \tilde{\psi}). \end{aligned} \quad (14.3.12)$$

En multipliant gauche et droite cette identité respectivement par $\tilde{\chi}_{x_0}$ et $\tilde{\chi}_{y_0}$, on voit que

$$\begin{aligned} \|\tilde{\chi}_{x_0} R\varepsilon \tilde{\chi}_{y_0}\| &\leq C_\eta e^{c\eta/h} [e^{-(d(y_0; \partial I) + d(\partial I; x_0))/h} + e^{-(d(y_0; U_{NR}^h) + d(U_{NR}^h; x_0))/h}] \\ &\leq 2C_\eta e^{c\eta/h} e^{-d(y_0; x_0)/h}. \end{aligned}$$

Ensuite, partant de (14.3.12), et composant par ε , on trouve :

$$\begin{aligned} R\varepsilon^2 &= -(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}[p(h), \chi](H_D^{NR}(h) - z)^{-1}W_{NR}^h(H(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \tilde{\psi}) \\ &\quad - \chi(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}W_{NR}^h[p(h), \chi](H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\tilde{\psi}, \end{aligned} \quad (14.3.13)$$

ce qui donne que

$$\|\tilde{\chi}_{x_0} R\varepsilon^2 \tilde{\chi}_{y_0}\| \leq C_\eta e^{c\eta/h} e^{-\varphi(x_0; y_0)/h},$$

où la fonction φ , donnée par :

$$\begin{aligned} \varphi(x, y) &= \min \left(\begin{aligned} &d(y; U_{NR}^h) + d(U_{NR}^h; \partial I) + d(\partial I; x); \\ &d(y; \partial I) + d(\partial I; U_{NR}^h) + d(U_{NR}^h; x) \end{aligned} \right) \\ &\geq d(x_0; y_0) + S_{NR} \end{aligned}$$

peut s'interpréter comme la longueur du plus court chemin joignant x et y en passant par les puits non-résonants et le bord de l'île.

De façon générale, en itérant le procédé, on voit que si l'on pose

$$\varepsilon_0 := W_{NR}^h(H(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \tilde{\psi}), \quad \varepsilon_1 := -[p(h), \chi](H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\tilde{\psi} \quad (14.3.14)$$

alors on a $\bar{k} \neq \bar{k}' \Rightarrow \varepsilon_{\bar{k}} \varepsilon_{\bar{k}'} = 0$, \bar{k} désignant la classe de k dans $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$. Comme on a aussi $\varepsilon = \varepsilon_0 + \varepsilon_1$, il suit que pour $n \geq 2$,

$$R\varepsilon^n = (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} \prod_{k=1}^n \varepsilon_{\bar{k}} + (H_D^{NR}(h) - z)^{-1} \prod_{k=1}^n \varepsilon_{\overline{k+1}} \quad (14.3.15)$$

Finalement

$$\forall n \geq 2, \quad \|\tilde{\chi}_{x_0} R\varepsilon^n \tilde{\chi}_{y_0}\| \leq \left[C_\eta e^{c\eta/h} \right]^{n-1} e^{-\varphi_n(x_0; y_0)/h}, \quad (14.3.16)$$

où cette fois

$$\begin{aligned} \varphi_n(x, y) &= \min \left(\begin{aligned} &d(y; U_{NR}^h) + (n-1)S_{NR} + d(\partial I; x); \\ &d(y; \partial I) + (n-1)S_{NR} + d(U_{NR}^h; x) \end{aligned} \right) \\ &\geq d(x; y) + (n-1)S_{NR}. \end{aligned} \quad (14.3.17)$$

La série de terme général $\tilde{\chi}_{x_0} (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} \tilde{\chi}_{y_0}$ est finalement convergente et on a avec (14.3.16) et (14.3.17) l'estimation annoncée. ■

Prolongement méromorphe de la résolvante. Résonances

Le travail du chapitre précédent permet de calculer de façon assez précise le prolongement méromorphe de la résolvante par des manipulations algébriques, conjuguées à des méthodes d'Agmon : on réduit dans un premier temps la question de l'inversibilité du problème avec conditions aux limites résonantes à un problème matriciel, donc de dimension finie, en adoptant un point de vue perturbatif. L'idée étant toujours la même : du point de vue spectral, les conditions aux limites sur le problème elliptique entraînent peu de fluctuations : on peut donc approcher les conditions résonantes par les conditions de Dirichlet. Par ailleurs, du point de vue géométrique, on peut penser d'après les résultats du chapitre précédent, par des estimations d'Agmon, que loin des puits résonants, les opérateurs $H(z; h)$ et $H^{NR}(z; h)$ sont interchangeables. Le formalisme du problème de Grushin est adapté à cette situation. Il sera aisé ensuite de déduire une formule pour la résolvante de l'hamiltonien $H(h)$ pour $z \in \Omega(\varepsilon_0, h)$. En outre, cette analyse fine permet de localiser avec précision les résonances, et de retrouver les résultats du cas particulier de la proposition 7.15 p.82.

15.1 Hypothèses de travail

Si l'on pense aux résonances comme fluctuations de valeurs propres, il est naturel de partir du problème de Dirichlet. On commence par fixer une énergie résonante λ_l dans $[\Lambda_*, \Lambda^*]$ et on s'intéresse aux valeurs propres du problème de Dirichlet associé à $H_D(h)$ convergeant vers λ_l .

■ **15.1. Notation.** On notera $H_D(h) \equiv H_D$ la réalisation de Dirichlet sur I de l'opérateur

$$p(h) := -h d^2/dx^2 + \tilde{\mathcal{V}}^h - W^h.$$

$$D(H_D(h)) = H^2(I) \cap H_0^1(I), \quad \forall u \in D(H_D(h)), \quad H_D(h)u := p(h)u.$$

■ **15.2. Hypothèse.** On suppose que la famille de fonctions $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ est dans $W^{1,\infty}(I)$, et uniformément bornée dans $W^{1,\infty}(I)$. On suppose en outre que :

$$\inf_{h>0} \inf_{x \in I} \tilde{\mathcal{V}}^h(x) \geq \Lambda_0 > 0, \quad (15.1.1)$$

et que la famille $(\tilde{\mathcal{V}}^h)_{h>0}$ converge dans $C^0(I)$. Notons $\tilde{\mathcal{V}}^0$ la limite :

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|\tilde{\mathcal{V}}^h - \tilde{\mathcal{V}}^0\|_\infty = 0. \quad (15.1.2)$$

■ **15.3. Hypothèse.** On fixe un segment $[\Lambda_*; \Lambda^*] \subset (-\infty; \Lambda_0[$ et on étudiera pour tout $h > 0$ l'ensemble :

$$\sigma(H_D(h)) \cap [\Lambda_*; \Lambda^*].$$

■ **15.4. Notation.** On pose $\mathcal{E}_{rés} := \mathcal{E}(H_D(h)) \cap [\Lambda_*; \Lambda^*]$, $r := \text{Card } \mathcal{E}_{rés}$. On notera

$$\mathcal{E}_{rés} := \{\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_r\}, \quad \Lambda_* \leq \lambda_1 < \lambda_r \leq \Lambda^*.$$

On pose également

$$3\varepsilon_0 := \text{dist}(\lambda_1, \mathcal{E}(H_D(h)) \setminus \mathcal{E}_{rés.}) > 0, \quad 3\varepsilon_r := \text{dist}(\lambda_r, \mathcal{E}(H_D(h)) \setminus \mathcal{E}_{rés.}) > 0,$$

le symbole dist désignant la distance euclidienne usuelle.

Dorénavant, on fixera

$$\varepsilon_* := \min\{\varepsilon_0; \varepsilon_r\} > 0,$$

et on travaillera sur l'ouvert $\Omega(\varepsilon_*; h)$. Noter que les intervalles $[\lambda_l; \lambda_{l+1}]$, pour $l = 1 \dots r-1$, auxquels on ajoute $[\lambda_r + \varepsilon_*; \lambda_1 - \varepsilon_*]$ forment un recouvrement du voisinage compact $\overline{\mathcal{I}(\varepsilon_*)}$ de $[\Lambda_*; \Lambda^*]$. Comme pour tout $l = 1 \dots r$, $H_D(h)$ possède dans un voisinage fixe de λ_l exactement $m(\lambda_l)$ valeur propres convergeant toutes vers λ_l , on introduit aussi :

■ **15.5. Notation.** On note pour $l = 1 \dots r$,

$$\kappa_l(h) := \{ \lambda_1(h), \dots, \lambda_{m(\lambda_l)}(h) \},$$

l'ensemble des valeurs propres de $H_D(h)$ dans $\mathcal{I}(\varepsilon_*)$ convergeant vers λ_l , et on désigne par $\phi_1(h), \dots, \phi_{m(\lambda_l)}(h)$ un système orthonormé de vecteurs propres associés. On posera alors pour tout $l = 1 \dots r$

$$a_l(h) := 2 \max \{ h; \max_{\lambda \in \kappa_l(h)} |\lambda_l - \lambda|; \alpha(h) \}, \quad a_0 := \varepsilon_*,$$

le nombre $\alpha(h)$ ayant été introduit dans la proposition 14.13 p. 167. Enfin on considèrera les ouverts du plan complexe $\omega_l(h)$ définis par

$$\omega_l(h) := [\lambda_{l-1} + a_{l-1}(h); \lambda_l + a_l(h)] \times [-h; h], \quad l = 1 \dots r.$$

15.6. Remarque.

1. Noter que l'on a les inclusions (cf. figure 15.1)

$$\Omega(\varepsilon_*; h) \subset \bigcup_{l=1}^r \omega_l(h), \quad \sigma(H_D(h)) \cap \mathcal{I}(\varepsilon_*) = \bigcup_{l=1}^r \kappa_l(h),$$

la dernière réunion étant même disjointe pour $h > 0$ petit.

2. Le choix de $a_l(h)$ garantit l'inversibilité de l'opérateur $H^{NR}(\zeta; h) - z$ pour z dans le domaine $\omega_l(h)$ explicité ci-après avec de bonnes estimations de résolvantes, puisque dans ce cas la proposition 14.17 p. 170 s'applique. Par ailleurs les estimations d'Agmon à l'énergie λ_l sont uniformes dans $\omega_l(h)$.

Afin de calculer le prolongement méromorphe de la résolvante de $H(h)$ sur tout $\Omega(\varepsilon_*; h)$, à énergie résonante fixée, on travaillera dans l'ouvert $\omega_l(h)$.

15.2 Situation de référence

Pour un exposé plus explicite sur le formalisme de Grushin ainsi que sur les propriétés basiques des coefficients de la matrice de Grushin, on pourra se reporter à l'appendice de [HeSj1] ou à l'article consacré [SjZw].

Afin d'alléger l'écriture, on posera $n := m(\lambda_l)$, la multiplicité asymptotique de l'énergie résonante λ_l .

À présent, considérons alors le problème de Grushin suivant :

$$\begin{cases} (H_D(h) - z)u + R_0^- u^- = v \\ R_0^+ u = v^+, \end{cases} \quad (15.2.1)$$

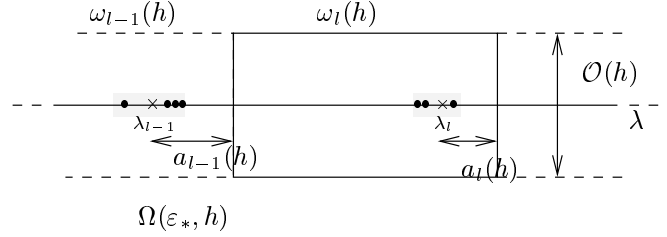


Figure 15.1. Ensemble $\omega_l(h)$: Les estimations sont uniformes pour la distance d'Agmon à l'énergie λ_l . Pour z sur le bord de $\omega_l(h)$, la distance de z au spectre de $H_D(h)$ (localisée dans la zone en gris) est minorée par h par définition des $a_\kappa(h)$. Enfin les $\omega_l(h)$ recouvrent la région $\Omega(\varepsilon_*, h)$ du plan complexe.

avec

$$(u, u^-) \in D(H_D) \times \mathbb{C}^n, \quad (v, v^+) \in L^2(I) \times \mathbb{C}^n,$$

$$R_0^+ : \mathbb{C}^n \longrightarrow L^2(I), \quad u^- := \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} \mapsto R_0^- u^- := \sum_{l=1}^n u_l^- \phi_l(h), \quad (15.2.2)$$

et

$$R_0^+ : L^2(I) \longrightarrow \mathbb{C}^n, \quad u \mapsto R_0^+ u := \begin{pmatrix} \langle u, \phi_1(h) \rangle_{L^2} \\ \vdots \\ \langle u, \phi_n(h) \rangle_{L^2} \end{pmatrix}. \quad (15.2.3)$$

Posant $E'' := \text{Vect} \{ \phi_l(h) \}_{l=1}^n$ et $E' := (E'')^\perp$, dans cette décomposition, le système (15.2.1) est équivalent avec des notations évidentes à

$$\begin{cases} (H_D - z)u'' + (H_D - z)u' + \sum_{l=1}^n u_l^- \phi_l(h) = v'' + v' \\ \langle u, \phi_l(h) \rangle = v_l^+, \quad l = 1 \dots n \end{cases} \quad (15.2.4)$$

ou encore

$$\begin{cases} (\lambda_l(h) - z)\langle u, \phi_l(h) \rangle + u_l^- = \langle v, \phi_l \rangle, \quad l = 1..n \\ (H_D - z)u' = v' \\ \langle u, \phi_l(h) \rangle = v_l^+, \quad l = 1..n \end{cases} \quad (15.2.5)$$

Si H_D' désigne la restriction de H_D à E' , la solution (u, u^-) unique s'écrit :

$$\begin{cases} u' = (H_D' - z)^{-1}v' \\ u'' = \sum_{l=1}^n \langle u, \phi_l \rangle \phi_l = \sum_{l=1}^n v_l^+ \phi_l(h) \\ u_l^- = \langle v, \phi_l \rangle + (z - \lambda_l(h))v_l^+, \quad l = 1 \dots n \end{cases} \quad (15.2.6)$$

En termes d'opérateurs, on récrit cela

$$\begin{cases} u = E_0(z)v + E_0^+(z)v^+ \\ u^- = E_0^-(z)v + E_0^{-+}(z)v^+, \end{cases} \quad (15.2.7)$$

avec

$$\begin{aligned} E_0(z)v &= (H_D^I - z)^{-1}\Pi v, & E_0^+(z)v^+ &= \sum_{l=1}^n v_l^+ \phi_l(h), \\ (E_0^-(z)v) &= (\langle v, \phi_1(h) \rangle \dots \langle v, \phi_n(h) \rangle), & E_0^{-+}(z)v^+ &= \text{diag}(z - \lambda_l(h))v^+, \end{aligned}$$

où Π désigne le projecteur orthogonal sur E' :

$$\Pi v := \left(1 - \sum_{l=1}^n |\phi_l(h)\rangle \langle \phi_l(h)| \right) v.$$

Noter que l'on a

$$E_0^- = R_0^+, \quad E_0^+ = R_0^-, \quad (R_0^+)^* = R_0^-.$$

■ **15.7. Notation.** On pose

$$\mathcal{H}_D(z) := \begin{pmatrix} H_D - z & R_0^- \\ R_0^+ & 0 \end{pmatrix},$$

et aussi

$$\mathcal{E}_D(z) := \begin{pmatrix} E_0(z) & E_0^+ \\ E_0^- & E_0^{-+}(z) \end{pmatrix} = \mathcal{H}_D(z)^{-1}.$$

Ce qui donne les relations de Grushin

$$(H_D - z)E_0(z) + R_0^- E_0^-(z) = Id \quad (15.2.8)$$

$$(H_D - z)E_0^+(z) + R_0^- E_0^{-+}(z) = 0 \quad (15.2.9)$$

$$R_0^+ E_0(z) = 0 \quad (15.2.10)$$

$$R_0^+ E_0^+(z) = Id \quad (15.2.11)$$

15.3 Construction d'un inverse approché

D'après la proposition 7.5 p.75, il revient au même sur I de remplacer $H(h)$ par $H(z; h)$. Par ailleurs, d'après la proposition 7.2 p.73, les résonances de $H(h)$ sont caractérisées comme les pôles de la fonction $(H(z; h) - z)^{-1}$. On va donc interpréter le problème :

$$u \in D(H(z; h)), \quad (H(z; h) - z)u = f, \quad f \in L^2(I) \quad (15.3.1)$$

à l'aide d'une matrice à coefficients holomorphes et proche de $\mathcal{H}_D(z)$, ce qui fournira une expression de $(H(z; h) - z)^{-1}$ sous forme de série perturbative du problème de Dirichlet. Simultanément, un argument de décompte type Rouché permet de localiser les résonances de $H(h)$.

■ **15.8. Définition.** On fixe l'énergie de référence à $\lambda = \lambda_l$ et on notera d la distance d'Agmon relativement au potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h - W^h$ et à l'énergie λ_l :

$$\forall x, y \in I, \quad x \leq y, \quad d(x, y) = \int_x^y \sqrt{(\tilde{\mathcal{V}}^h(\tau) - W^h(\tau) - \lambda_l)_+} d\tau. \quad (15.3.2)$$

On pose

$$S_0 := d(\partial I; U_R^h),$$

la distance des puits résonants pour l'énergie λ_l à la mer. Rappelons que $U_R^h = \cup_{i \in J(\lambda_l)} [c_i - h; c_i + h]$. Enfin on notera pour $r > 0$ et $F \subset I$

$$\mathcal{B}(F; r) := \{x \in I \mid d(x, F) \leq r\},$$

l'ensemble des points de I à distance (d'Agmon) au plus r de F .

On introduit ensuite les fonctions de troncature qui partitionnent l'espace en régions puits/hors-puits :

■ **15.9. Notation.** Pour $\eta > 0$ petit fixé soient deux fonctions lisses de troncature χ et ψ supportées dans I (voir figure 15.3) telles que

$$\begin{aligned} \chi &\in C_c^\infty(I), \quad 0 \leq \chi \leq 1, \quad \chi \equiv 1 \text{ dans } \mathcal{B}(U_R^h; S_0 - \eta), \\ \psi &\in C_c^\infty(I), \quad 0 \leq \psi \leq 1, \quad \psi \equiv 1 \text{ dans } \mathcal{B}(U_R^h; \frac{S_0 - \eta}{2}), \\ &\quad \psi \equiv 0 \text{ dans } \mathcal{B}^c(U^h; \frac{S_0 + \eta}{2}). \end{aligned}$$

On pose à présent :

$$\mathcal{H}(\zeta, z; h) := \begin{pmatrix} H(\zeta; h) - z & \chi R_0^- \\ R_0^+ & 0 \end{pmatrix}, \quad \zeta \in \Omega(\varepsilon_*; h), \quad (15.3.3)$$

la matrice de Grushin dont on souhaite calculer l'inverse, à interpréter comme matrice d'une application linéaire continue entre $D(H(\zeta; h)) \times \mathbb{C}^n$ et $L^2(I)$, le domaine de $H(\zeta; h)$ étant équipé de la norme du graphe $|\cdot|_G$

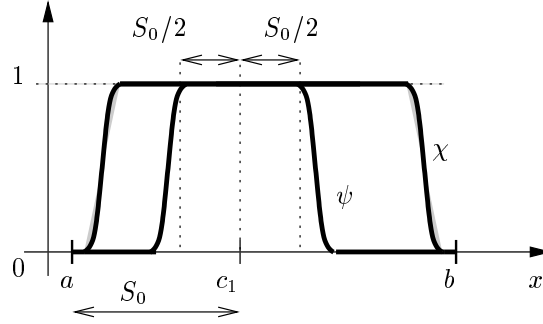


Figure 15.2. Supports des fonctions χ et ψ .

15.3.1 Inverse approché à droite

On s'attend à ce que cet inverse ressemble à $\mathcal{E}_D(z)$. Conformément à l'idée exposée au début du chapitre, on pose

$$\mathcal{F}(\zeta, z; h) \equiv \mathcal{F}(\zeta, z) := \begin{pmatrix} \chi E_0 \psi + (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \psi) & \chi E_0^+ \\ E_0^- \psi & E_0^{-+} \end{pmatrix}. \quad (15.3.4)$$

15.10. Remarque. Une construction directe, et analogue à celle de (14.3.1), qui consisterait à ne travailler qu'avec le bloc supérieur gauche, et en remplaçant $E_0(z)$ par $(H_D(h) - z)^{-1}$ est sans espoir : pour z voisin de λ_l , $(H_D(h) - z)$ n'est pas injectif. Le procédé de Grushin consiste précisément à retirer le sous espace spectral de $(H_D(h) - z)$ dans $\omega_l(h)$, (et obtenir l'injectivité) et à compenser le défaut de surjectivité par le facteur direct E' .

Un calcul direct, très similaire à celui démontrant la proposition 14.16, donne ensuite, notamment d'après la définition 14.12

$$\mathcal{H}(\zeta, z; h) \mathcal{F}(\zeta, z; h) = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix},$$

avec

$$\begin{aligned} A &= 1 - W_R^h(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \psi) + [P(h), \chi] E_0 \psi \\ B &= (H(\zeta; h) - z) \chi E_0^+ + \chi R_0^- E_0^{-+} \\ C &= R_0^+ (\chi E_0 \psi + (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \psi)) \\ D &= R_0^+ \chi E_0^+. \end{aligned}$$

L'expression de A a été obtenue avec (15.2.8) et le fait que $P(h)\chi = H_D\chi$. Utilisant ensuite que $\text{Ran}(E_0^+) \subset D(H_D)$ et (15.2.9) on trouve

$$B = [P(h), \chi] E_0^+.$$

Par (15.2.10) on peut changer C en

$$C = R_0^+(\chi - 1)E_0\psi + R_0^+(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \psi),$$

et de même pour D on obtient avec (15.2.11)

$$D = 1 + R_0^+(\chi - 1)E_0^+.$$

Si bien que l'on a

$$\mathcal{H}_D(z)\mathcal{F}(\zeta, z; h) = 1 + \mathcal{K}(\zeta, z; h), \quad (15.3.5)$$

avec

$$\mathcal{K}(\zeta, z; h) = \begin{pmatrix} (a) + (b) & (c) \\ (d) + (e) & (f) \end{pmatrix}$$

et les coefficients de $\mathcal{K}(\zeta, z; h)$ sont donnés par

$$\begin{aligned} (a) &= -W_R^h(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \psi) \\ (b) &= [P(h), \chi]E_0\psi \\ (c) &= [P(h), \chi]E_0^+ \\ (d) &= R_0^+(\chi - 1)E_0\psi \\ (e) &= R_0^+(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \psi) \\ (f) &= R_0^+(\chi - 1)E_0^+. \end{aligned}$$

Il suffit encore de montrer que les coefficients du reste $\mathcal{K}(\zeta, z; h)$ sont petits uniformément par rapport à $\zeta \in \omega_l(h)$. On peut établir ensuite (cf. définition 15.8)

■ **15.11. Proposition.** $\mathcal{K}(\zeta, z; h)$ vérifie uniformément par rapport à z, ζ dans $\omega(h)$ pour $h \rightarrow 0$

$$\mathcal{K}(\zeta, z; h) = \begin{pmatrix} \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{2h}}) & \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{h}}) \\ \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{2h}}) & \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}) \end{pmatrix}$$

Preuve. On utilise les estimations à poids du chapitre 8, ainsi qu'une fonction φ comme dans le lemme 8.7 approchant à moins de η . Le caractère C^∞ de φ permet d'effectuer des estimations en norme $|\cdot|_{2,h}$. La commutation de la dérivation avec $e^{\varphi/h}$ ne coûte que des puissances de h , tandis qu'échanger φ et d induit un facteur $e^{\eta/h}$. Comme on travaille modulo \tilde{O} , cela est sans conséquence dans les estimations.

À présent, effectuons les estimations :

1. terme (a) : $\forall g \in L^2$,

$$\begin{aligned} |W_R^h(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \psi)g| &\leq |e^{\frac{\varphi}{h}}W_R^he^{-\frac{\varphi}{h}}(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \psi)g| \\ &\leq C|e^{\frac{\varphi}{h}}W_R^h|_{L^\infty}|e^{-\frac{\varphi}{h}}(1 - \psi)g|, \end{aligned}$$

Or, sur le support de $1 - \psi$, $\varphi \geq \frac{S_0}{2} + \mathcal{O}(\eta)$, si bien que

$$|W_R^h(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \psi)g| = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{2h}})|g|,$$

et

$$(a) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{2h}}). \quad (15.3.6)$$

2. terme (b) : $\forall g \in L^2$,

$$|[P(h), \chi]E_0\psi g| = |[P(h), \chi](H_D(h) - z)^{-1}\Pi\psi g|,$$

Il est facile d'établir une estimation pondérée du type de celle de la proposition 14.3 :

■ **15.12. Lemme.** *On a uniformément par rapport à $z \in \omega(h)$:*

$$|e^{\frac{\varphi}{h}}E_0(z)u|_{2,h} = \tilde{\mathcal{O}}(|e^{\frac{\varphi}{h}}u|_{L^2}), \quad h > 0 \text{ assez petit}. \quad (15.3.7)$$

Preuve. Il suffit d'écrire la relation suivante, valable pour tout $\xi \notin \sigma(H_D(h))$ d'après le formalisme de Grushin :

$$(H_D(h) - \xi)^{-1} = E_0(\xi) - E_0^- E_0^{-+}(\xi)^{-1} E_0^+, \quad (15.3.8)$$

puis de multiplier par $(\xi - z)^{-1}$. On remarque ensuite que pour tout ξ , on peut trouver un rectangle entourant ξ et $\kappa_l(h)$, dont les points sont à distance $\geq h$ du spectre de $H_D(h)$. En intégrant sur ce rectangle on obtient

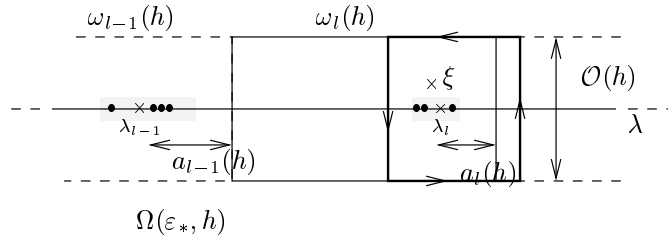


Figure 15.3. Pour tout $\xi \in \omega_l(h)$, on peut trouver un rectangle entourant ξ et $\kappa_l(h)$, dont les points sont à distance $\geq h$ du spectre de $H_D(h)$.

$$\frac{1}{2i\pi} \int_{\partial\mathcal{R}(h)} (\xi - z)^{-1} (H_D(h) - \xi)^{-1} d\xi = E_0(z). \quad (15.3.9)$$

On applique ensuite la proposition 13.21 estimant le noyau de $(H_D(h) - \xi)^{-1}$, puisque dans ce cas pour ξ sur le bord du rectangle, $r(h) \geq h$. ■

Pour en revenir à l'égalité $|[P(h), \chi]E_0\psi g| = |[P(h), \chi](H_D(h) - z)^{-1}\Pi\psi g|$: vu la régularité de φ et le fait que $[P(h), \chi]$ est un opérateur différentiel d'ordre 1 à coefficients C^∞ , on peut faire commuter ∂_x avec $e^{\frac{\varphi}{h}}$, ce qui donne

$$\begin{aligned} |e^{\frac{\varphi}{h}}[P(h), \chi]E_0\psi g| &\leq \frac{C}{h}|[P(h), \chi]e^{\frac{\varphi}{h}}E_0\psi g| + \frac{C}{h}|e^{\frac{\varphi}{h}}E_0\psi g| \\ &\leq \frac{C}{h}|e^{\frac{\varphi}{h}}E_0\psi g|_{H^1}. \end{aligned}$$

Avec le lemme 15.12, on obtient

$$|e^{\frac{\varphi}{h}}[P(h), \chi]E_0\psi g| = \tilde{O}(|e^{\frac{\varphi}{h}}\psi g|).$$

Sur le support de coefficients de $[P(h), \chi]$ φ est de l'ordre de S_0 . On obtient

$$|[P(h), \chi]E_0\psi g| = \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{2h}})|g|,$$

et

$$(b) = \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{2h}}). \quad (15.3.10)$$

3. terme (c) : comme pour $u = (u_1, \dots, u_n) \in \mathbb{C}^n$,

$$|[P(h), \chi]E_0^+ u| \leq \sum_j |u_j [P(h), \chi]\phi_j(h)|,$$

on conclut que

$$(c) = \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{h}}). \quad (15.3.11)$$

Par des considérations de même nature on trouve

$$(d) = \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{h}}) \quad (15.3.12)$$

$$(e) = \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{2h}}) \quad (15.3.13)$$

$$(f) = \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}), \quad (15.3.14)$$

ce qui achève de prouver la proposition. ■

15.3.2 Inverse approché à gauche

On vient donc de prouver que pour h assez petit, $\mathcal{H}(\zeta, z; h)$ est surjectif. Il s'agit maintenant de trouver un inverse à gauche approché de $\mathcal{H}(\zeta, z; h)$, en employant la même méthode, l'égalité

$$\mathcal{E}_D(z)\mathcal{H}_D(z) = 1$$

conduit aux nouvelles relations¹¹ de Grushin

$$E_0(z)(H_D(h) - z) + E_0^+(z)R_0^+ = 1 \quad (15.3.15)$$

$$E_0(z)R_0^- = 0 \quad (15.3.16)$$

$$E_0^-(z)(H_D(h) - z) + E_0^{-+}(z)R_0^+ = 0 \quad (15.3.17)$$

$$E_0^-(z)R_0^- = 1, \quad (15.3.18)$$

et on pose :

$$\mathcal{G}(\zeta, z; h) := \begin{pmatrix} \psi E_0 + (1 - \psi)(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} & \chi E_0^+ \\ E_0^- & E_0^{-+} \end{pmatrix},$$

qui donne de nouveau par un calcul direct

$$\mathcal{G}(\zeta, z; h)\mathcal{H}(\zeta, z; h) = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix},$$

avec

$$\begin{aligned} A &= 1 - \psi - (1 - \psi)(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}W_R^h + \psi E_0(H(\zeta; h) - z) \\ &\quad + \chi(1 - E_0(H_D(h) - z)) \\ B &= \psi E_0(\chi - 1)R_0^- + (1 - \psi)(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}\chi R_0^- \\ C &= E_0^- H(\zeta; h) - E_0^- H_D(h) \\ D &= 1 + E_0^-(\chi - 1)R_0^-. \end{aligned}$$

Arrangeons les termes A et C : pour le terme A on écrit que

$$\psi E_0(H(\zeta; h) - z) = \psi E_0(1 - \chi + \chi)(H(\zeta; h) - z),$$

puis que

$$\chi(H(\zeta; h) - z) = -[P(h), \chi] + (H(\zeta; h) - z)\chi = -[P(h), \chi] + (H_D(h) - z)\chi,$$

et en utilisant (15.3.15) on obtient

$$\begin{aligned} A &= 1 + \psi E_0(1 - \chi)(H(\zeta; h) - z) - \psi E_0[P(h), \chi] \\ &\quad - (1 - \psi)(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}W_R^h \\ &\quad - \psi E_0^+ R_0^+ \chi + \chi E_0^+ R_0^+, \end{aligned}$$

et enfin on regroupe les deux derniers termes de la somme pour finalement arriver à

$$\begin{aligned} A &= 1 + \psi E_0(1 - \chi)(H(\zeta; h) - z) - \psi E_0[P(h), \chi] \\ &\quad - (1 - \psi)(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}W_R^h \\ &\quad + \chi \left((1 - \psi)E_0^+ R_0^+ + \psi E_0^+ R_0^+ (1 - \chi) \right). \end{aligned}$$

¹¹Noter que la relation (15.3.17) entraîne que $E_0(z)(H_D(h) - z)$ s'étend en une forme linéaire continue sur L^2 , car $E_0^{-+}(z)R_0^+ = \sum_{j=1}^n (z - \lambda_j(h))\langle \phi_h(h) |$

Quant au terme C , en écrivant également $u = (1 - \chi + \chi)u$, et en introduisant le commutateur, il vient

$$C = E_0^-(1 - \chi)H(\zeta; h) - E_0^-[P(h), \chi] - E_0^-H_D(h)(1 - \chi),$$

qui donne avec (15.3.17) en se souvenant que $\phi_j(h)$ est vecteur propre de $H_D(h)$

$$C = E_0^-(1 - \chi)H(\zeta; h) - E_0^-[P(h), \chi] + \sum_{j=1}^n \lambda_j(h) \langle (1 - \chi)\phi_j(h) |.$$

Finalement

$$\mathcal{G}(\zeta, z; h)\mathcal{H}(\zeta, z; h) = 1 + \mathcal{K}'(\zeta, z; h),$$

et $\mathcal{K}'(\zeta, z; h)$ vérifie :

■ **15.13. Proposition.** *On a uniformément par rapport à (z, ζ) dans $\omega_l(h) \times \Omega(\varepsilon_*; h)$ en norme d'opérateur*

$$\mathcal{K}'(\zeta, z; h) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{2h}}).$$

Preuve. Commençons par exemple par le terme $T := \psi E_0(1 - \chi)(H(\zeta; h) - z)$. Pour g dans $D(H(\zeta; h))$, on a

$$\begin{aligned} |e^{-\frac{\varphi}{h}} Tg|_G &= |e^{-\frac{\varphi}{h}} \psi E_0(1 - \chi)(H(\zeta; h) - z)g|_G \\ &= |e^{-\frac{\varphi}{h}} E_0(1 - \chi)(H(\zeta; h) - z)g|_{2,h} \\ &\leq \frac{C}{h^2} |e^{-\frac{\varphi}{h}} (1 - \chi)(H(\zeta; h) - z)g|_{L^2}, \end{aligned}$$

la dernière égalité découlant du lemme 15.12. Par suite

$$|e^{-\frac{\varphi}{h}} \psi E_0(1 - \chi)(H(\zeta; h) - z)g|_{H^2} \leq \frac{\tilde{\mathcal{O}}}{h^2} (e^{-\min_{\text{supp}(1-\chi)} \frac{\varphi}{h}}) |g|_{H^2},$$

et φ étant, modulo $\mathcal{O}(\eta)$, d'ordre S_0 sur $\text{supp}(1 - \chi)$, on a bien en norme d'opérateur

$$\|e^{-\frac{\varphi}{h}} \psi E_0(1 - \chi)(H(\zeta; h) - z)\| = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{h}}). \quad (15.3.19)$$

Enfin en faisant commuter la dérivation¹² avec $e^{-\varphi/h}\psi$, on voit que le membre de gauche de (15.3.19) est

$$\mathcal{O}\left(\frac{1}{h^2} \left(|e^{-\frac{\varphi}{h}} g|_{L^2} + |e^{-\frac{\varphi}{h}} g'|_{L^2} + |e^{-\frac{\varphi}{h}} g''|_{L^2}\right)\right).$$

¹²La commutation coûte des puissances négatives de h , ce qui est sans conséquence pour des estimations modulo $\tilde{\mathcal{O}}$

Comme sur le support de ψ , φ est au plus d'ordre $S_0/2$ modulo $\mathcal{O}(\eta)$ on aboutit à

$$|e^{-\frac{\varphi}{h}} \psi E_0(1 - \chi)(H(\zeta; h) - z)g|_{H^2} \geq \tilde{\mathcal{O}}\left(\frac{1}{h^2} e^{-\frac{S_0}{2h}}\right) |Tg|_{H^2}, \quad h \rightarrow 0. \quad (15.3.20)$$

Mettant bout à bout (15.3.19) et (15.3.20), on obtient finalement

$$|\psi E_0(1 - \chi)(H(\zeta; h) - z)|_{H^2} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{2h}}). \quad (15.3.21)$$

En reproduisant le même genre d'arguments on montre successivement que

$$\begin{aligned} |\psi E_0[P(h), \chi] &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{2h}}), \\ |(1 - \psi)(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} W_R^h| &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{2h}}), \\ |\chi(1 - \psi)E_0^+ R_0^+| &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{2h}}), \\ |\psi E_0^+ R_0^+(1 - \chi)| &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{h}}), \end{aligned}$$

ce qui finit d'estimer le premier coefficient de \mathcal{K}' . De même,

$$\begin{aligned} |\psi E_0(\chi - 1)R_0^-| &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{h}}), \\ |(1 - \psi)(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} \chi R_0^-| &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{2h}}), \end{aligned}$$

et le terme B est majoré. Ensuite pour C on trouve successivement :

$$\begin{aligned} |E_0^-(1 - \chi)P| &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{2h}}), \\ |E_0^-[P(h), \chi]| &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{h}}), \\ |z_0 \langle (1 - \chi)\phi | &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{h}}), \end{aligned}$$

Quant à $E_0^-(\chi - 1)R_0^-$,

$$|E_0^-(\chi - 1)R_0^-| = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{h}}),$$

et la proposition est démontrée. ■

On a trouvé un inverse approché de $\mathcal{H}(\zeta, z; h)$, ce qui permet d'énoncer :

■ 15.14. Proposition. *Pour $\zeta \in \Omega(\varepsilon_*; h)$ et pour tout z dans $\omega_l(h)$, l'opérateur $\mathcal{H}(\zeta, z; h) : D(H(\zeta; h)) \times \mathbb{C}^n \longrightarrow L^2 \times \mathbb{C}^n$ est inversible et*

$$\mathcal{H}(\zeta, z; h)^{-1} = \mathcal{F}(\zeta, z; h) \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \mathcal{K}^j(\zeta, z; h).$$

En outre la norme de $\mathcal{H}(\zeta, z; h)^{-1}$ est uniformément bornée par rapport à z, ζ . Enfin $\mathcal{H}(\zeta, z; h)^{-1}$ dépend holomorphiquement de z et de ζ .

■ **15.15. Notation.** On pose

$$\mathcal{H}(\zeta, z; h)^{-1} := \begin{pmatrix} E(\zeta, z; h) & E^+(\zeta, z; h) \\ E^-(\zeta, z; h) & E^{-+}(\zeta, z; h) \end{pmatrix},$$

et aussi

$$\mathcal{H}(z; h)^{-1} := \mathcal{H}(z, z; h)^{-1},$$

Même chose avec les matrices $\mathcal{F}(\zeta, z; h)$, $\mathcal{K}(\zeta, z; h)$, et $E^\bullet(\zeta, z; h)$, où $\bullet = +, -, - +$.

15.3.3 Estimations améliorées

On avait remarqué dans le cas particulier du calcul mené dans la partie 7.5.2 du chapitre 6.3 que la partie imaginaire de la résonance est $\mathcal{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}})$. On voudrait obtenir une estimation de cet ordre. Pour cela, on calcule directement à partir de l'expression établie juste après (15.3.5). On pose

$$\mathcal{K}^2(z) := \begin{pmatrix} Q & R \\ S & T \end{pmatrix}.$$

Où l'on a

$$\begin{aligned} Q = & \underbrace{[P(h), \chi] E_0 \psi [P(h), \chi] E_0 \psi}_{(1)} - \underbrace{[P(h), \chi] E_0 \psi W_R^h (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi)}_{(2)} \\ & - \underbrace{W_R^h (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi) [P(h), \chi] E_0 \psi}_{(3)} \\ & + \underbrace{W_R^h (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi) W_R^h (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi)}_{(4)} \\ & + [P(h), \chi] E_0^+ R_0^+ \underbrace{((\chi - 1) E_0 \psi)}_{(5)} + \underbrace{(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi)}_{(6)}. \end{aligned}$$

1. (1) est nul car ψ et les coefficients de $[P(h), \chi]$ sont à supports disjoints.
2. (2) est égal à $[P(h), \chi] E_0 W_R^h (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi)$ car $\psi W_R^h = W_R^h$.
3. (3) est égal à $W_R^h (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} [P(h), \chi] E_0 \psi$ car $(1 - \psi) [P(h), \chi] = [P(h), \chi]$.
4. (4) est nul car W_R^h et $(1 - \psi)$ sont à supports disjoints.

Finalement,

$$\begin{aligned} Q &= -[P(h), \chi] E_0 W_R^h (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi) \\ &\quad - W_R^h (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} [P(h), \chi] E_0 \psi \\ &\quad + [P(h), \chi] E_0^+ R_0^+ ((\chi - 1) E_0 \psi + (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi)). \end{aligned}$$

Similairement on trouve

$$\begin{aligned} R &= -W_R^h (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} [P(h), \chi] E_0^+ \\ S &= -R_0^+ (\chi - 1) E_0 W_R^h (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi) \\ &\quad + R_0^+ (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} [P(h), \chi] E_0 \psi, \\ &\quad + R_0^+ (\chi - 1) E_0^+ R_0^+ ((\chi - 1) E_0 \psi + (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi)), \\ T &= R_0^+ (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} [P(h), \chi] E_0^+ + R_0^+ (\chi - 1) E_0^+ R_0^+ (\chi - 1) E_0^+. \end{aligned}$$

À présent on peut affiner les majorations.

1. Termes de Q .

- (a) $-[P(h), \chi] E_0 W_R^h (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi)$:
en le récrivant $(-[P(h), \chi] E_0 \psi) (W_R^h (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi))$, il suffit d'appliquer les majorations de (b) et (a) pour conclure que ce terme est $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{h}})$.
- (b) $W_R^h (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} [P(h), \chi] E_0 \psi$:
en utilisant les majorations de (a) et de (b), on voit que ce terme est aussi $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{h}})$.
- (c) $[P(h), \chi] E_0^+ R_0^+ (\chi - 1) E_0 \psi$:
à l'aide des majorations de (d) et de (f) on obtient que ce terme est $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{3S_0}{2h}})$.
- (d) $[P(h), \chi] E_0^+ R_0^+ (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} (1 - \psi)$:
directement avec les majorations de (c) et de (e) on voit que ce terme est $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{3S_0}{2h}})$.

En conclusion :

$$Q = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{h}}). \quad (15.3.22)$$

2. **Estimation de R .** Si l'on exploite naïvement les majorations de (a) et de (d) on trouve que $R = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{3S_0}{2h}})$, ce qui est insuffisant pour le résultat visé. On écrit plutôt pour un vecteur complexe $u = (u_1 \dots u_n)$ quelconque que si l'on note

$$L(u) := -W_R^h (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} [P(h), \chi] E_0^+ u,$$

on a

$$\begin{aligned}
 |L(u)| &\leq C|u|_\infty \sum_j | -e^{-\frac{\varphi}{h}} W_R^h(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} [P(h), \chi] \phi_j |_{L^2} \\
 &\leq C|u|_\infty \sum_j |e^{-\frac{\varphi}{h}} (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} [P(h), \chi] \phi_j| \\
 &\leq \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{h}}) \left(\sum_j |\phi|_{H^1(\text{supp}(1-\chi))} \right) |u|_\infty,
 \end{aligned}$$

et on a finalement

$$R = \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}). \quad (15.3.23)$$

3. **Estimation de S .** On obtient que tous les termes de S excepté le second sont $\tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}})$. Il suffit pour cela d'utiliser pour chacun de ces trois termes respectivement les majorations de (g) et (a) , (g) et (e) , et de (g) et (f) . Quant au second terme il n'est qu'*a priori* $\tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{h}})$. Pour obtenir une majoration $S = \tilde{O}(e^{-\frac{3S_0}{2h}})$, on écrit que pour g dans L^2 (on fait $j = 1$ ici pour alléger l'écriture) :

$$\begin{aligned}
 &|R_0^+(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} [P(h), \chi] E_0 \psi g| \\
 &= \left| \int_a^b \phi(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1} [P(h), \chi] E_0 \psi g \right| \\
 &\leq C \|e^{\frac{\varphi}{h}} \phi\| \cdot \|e^{-\frac{\varphi}{h}} [P(h), \chi] E_0 \psi g\| \\
 &\leq \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{h}}) \cdot \|[P(h), \chi] E_0 \psi g\| \\
 &\leq \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}) \|g\| \quad (\text{majoration de (b)}),
 \end{aligned}$$

on passe à la première inégalité en appliquant la proposition 14.3 sur la résolvante à puits bouché, puis à la seconde en se souvenant que $\|e^{\frac{\varphi}{h}} \phi_j\| = \tilde{O}(1)$, et en utilisant la majoration (15.3.10) de la norme d'opérateur de $[P(h), \chi] E_0 \psi$. On est finalement parvenu à

$$S = \tilde{O}(e^{-\frac{3S_0}{2h}}). \quad (15.3.24)$$

4. **Estimation de T .** Le second terme de T est $\tilde{O}(e^{-\frac{4S_0}{h}})$ d'après la majoration faite de (g) . Quant au premier terme, il est *a priori* $\tilde{O}(e^{-\frac{3S_0}{2h}})$. Mais on peut

améliorer cela. Il suffit d'écrire

$$\begin{aligned}
& |R_0^+(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}[P(h), \chi]E_0^+| \\
&= |R_0^+(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}[P(h), \chi]\phi| \\
&= \left| \int_a^b \bar{\phi}(H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}[P(h), \chi]\phi \right| \\
&= \left| \int_a^b \bar{\phi} e^{\frac{\varphi}{h}} e^{-\frac{\varphi}{h}} (H_{NR}(\zeta; h) - z)^{-1}[P(h), \chi]\phi \right| \\
&\leq \|e^{\frac{\varphi}{h}}\phi\| \cdot \|e^{-\frac{\varphi}{h}}(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}[P(h), \chi]\phi\|
\end{aligned}$$

Le premier facteur du membre de droite de la dernière inégalité est $\tilde{O}(1)$ par la proposition 2. Quant au second facteur, il a été estimé lors de la majoration de R . On trouve donc

$$T = \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}). \quad (15.3.25)$$

On a alors les majorations améliorées :

$$\mathcal{K}^2(\zeta, z; h) = \begin{pmatrix} \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{h}}) & \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}) \\ \tilde{O}(e^{-\frac{S_0}{h}}) & \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}) \end{pmatrix}, \quad (15.3.26)$$

qui donnent, combinées avec le résultat de la proposition 15.11

$$\mathcal{K}^3(\zeta, z; h) = \begin{pmatrix} \tilde{O}(e^{-\frac{3S_0}{2h}}) & \tilde{O}(e^{-\frac{5S_0}{2h}}) \\ \tilde{O}(e^{-\frac{3S_0}{2h}}) & \tilde{O}(e^{-\frac{5S_0}{2h}}) \end{pmatrix}, \quad (15.3.27)$$

et qui vont nous permettre de localiser la résonance. En effet, partant de l'expression de l'inverse dans la proposition 15.14 et utilisant la Proposition 5 ainsi que (15.3.26) et (15.3.27), il vient par un calcul direct du dernier coefficient de $\mathcal{H}(\zeta, z; h)^{-1}$, avec la notation 15.15

$$\begin{aligned}
E^{-+}(\zeta, z; h) &= E_0^{-+}(z) - \mathcal{F}_{2,1}\mathcal{K}_{1,2} - E_0^{-+}(z)\tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}) + \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}})E_0^{-}\psi \\
&\quad + E_0^{-+}(z)\tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}) + \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}).
\end{aligned} \quad (15.3.28)$$

Comme ψ et les coefficients de $[P, \chi]$ sont à supports disjoints, le coefficient $\mathcal{F}_{2,1}\mathcal{K}_{1,2}$ est nul, ce qui donne

$$E^{-+}(\zeta, z; h) = \begin{pmatrix} z - \lambda_1(h) & & \\ & \ddots & \\ & & z - \lambda_n(h) \end{pmatrix} + \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}). \quad (15.3.29)$$

15.4 Détection des résonances

15.4.1 Localisation des résonances

D'après la formulation de Grushin, $H(\zeta; h) - z$ est inversible si et seulement si la matrice de dimension finie $E^{-+}(\zeta, z; h)$ l'est. On conclut donc :

■ **15.16. Théorème.** *Pour tout $\zeta \in \Omega(\varepsilon; h)$, il existe $m(\lambda_l)$ nombres complexes dans $\omega_l(h)$, $z_1(\zeta; h), \dots, z_{m(\lambda_l)}(\zeta; h)$, répétés avec multiplicité pour lesquels l'opérateur $H(\zeta; h) - z$ n'est pas inversible. Notons $\mathcal{Z}(\zeta; h) := \{z_1(\zeta; h), \dots, z_n(\zeta; h)\}$. On a uniformément par rapport à ζ*

$$\mathcal{Z}(\zeta; h) \subset \bigcup_{i=1}^{m(\lambda_l)} \left\{ z \in \mathbb{C} \mid |z - \lambda_i(h)| = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2S_0}{h}}) \right\}. \quad (15.4.1)$$

15.17. Remarque. Au voisinage d'un pôle simple de $(H(\zeta_0; h) - z)^{-1}$, la dépendance est holomorphe par rapport à ζ .

Preuve. Considérons le contour orienté $\partial\gamma(h)$ (voir figure 15.4), et récrivons (15.3.29) :

$$E^{-+}(\zeta, z; h) = \begin{pmatrix} z - \lambda_1(h) & & \\ & \ddots & \\ & & z - \lambda_n(h) \end{pmatrix} + F(\zeta, z; h),$$

où F est une matrice à coefficients holomorphes dont les coefficients sont $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2S_0}{h}})$, et ceci uniformément par rapport à ζ . On remarque en suite, avec des notations évidentes que

$$\det(E^{-+}(\zeta, z; h)) = \prod_{i=1}^n (z - \lambda_i(h)) + \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_n; \sigma \neq Id} \varepsilon(\sigma) \prod_{i=1}^n ((z - \lambda_i(h)) \delta_{i, \sigma(i)} + F_{i, \sigma(i)}). \quad (15.4.2)$$

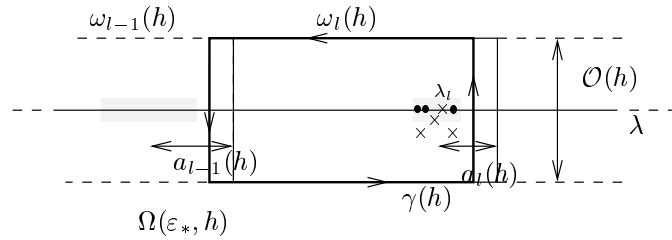


Figure 15.4. Application du théorème de Rouché : il y a autant de z (avec multiplicité) que de λ . On a $\gamma(h) \cap \mathbb{R} = \{\lambda_{l-1} + a_{l-1}(h)/3; \lambda_l + a_l(h)/3\}$.

Sur $\partial\gamma(h)$, le premier terme de la somme, qui est une fonction possédant n zéros dans $\omega(h)$, se minore, par le choix de $a_s(h)$ par $C \cdot h$ tandis que le second se majore par $\mathcal{O}(h^{n-1})\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2S_0}{h}})$, le tout uniformément par rapport à ζ . Le théorème de Rouché dit alors que $E^{-+}(\zeta, z; h)$ possède n valeurs singulières dans $\omega(h)$, ce

qui démontre la première assertion du théorème.

Par ailleurs, on voit directement que si pour tout j , $|z - \lambda_j(h)| > \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}})$, alors $E^{-+}(\zeta, z; h)$ est inversible et on obtient l'estimation du théorème. ■

En liant les variables ζ et z par $\zeta = z$, on voit que les valeurs singulières de $E^{-+}(z, z; h)$ sont les z pour lesquels l'opérateur $H(z; h) - z$ n'est pas inversible : ce sont les résonances de $H(h)$ d'après la proposition 7.2. On obtient :

■ **15.18. Corollaire.** Dans $\omega_l(h)$, l'opérateur $H(h)$ possède exactement $m(\lambda_l)$ résonances, $z_1(h) \dots z_{m(\lambda_l)}(h)$ répétées avec multiplicité. Notons

$$\mathcal{R}(h) := \{z_1(h), \dots, z_{m(\lambda_l)}(h)\}.$$

Alors :

$$\mathcal{R}(h) \subset \bigcup_{i=1}^{m(\lambda_l)} \left\{ z \in \mathbb{C} \mid |z - \lambda_i(h)| = \tilde{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}) \right\}. \quad (15.4.3)$$

15.19. Remarque. Noter en particulier que l'on a $z_j(h) = z(z_j(h); h)$.

■ **15.20. Définition.** On appellera multiplicité algébrique de la résonance $z_i(h)$ l'ordre d'annulation de la fonction $\det E^{-+}(z)$ en $z_i(h)$.

15.21. Remarque. Cette notion ne dépend que de l'opérateur $H(h)$ dans le sens où l'on peut relier la multiplicité algébrique de la valeur propre $z_i(h)$ pour l'opérateur déformé A introduit dans la définition 7.1 p.71.

15.4.2 Signe la partie imaginaire des résonances

■ **15.22. Proposition.** Soit $z_i(h)$ une résonance de $H(h)$ dans $\omega(h)$. Alors $z_i(h)$ vérifie en outre

$$\operatorname{Im}(z_i(h)) < 0.$$

Preuve. Soit $v_i(h)$ un vecteur non nul de $L^2(]a, b[)$ tel que $H(z_i(h); h)v_i(h) = z_i(h)v_i(h)$. Un tel vecteur existe puisque $H(z; h)$ est un opérateur de Fredholm

d'indice nul. Comme $H(z_i(h); h) - z_i(h)$ n'est pas inversible, il n'est pas injectif. On a

$$\operatorname{Im} \left(\langle (H(z_i(h); h) - z_i(h))v_i(h) | v_i(h) \rangle_{L^2} \right) = 0,$$

mais par ailleurs cette quantité vaut également d'après un calcul analogue à (14.1.2) p.160

$$\operatorname{Im} \left(\frac{h}{i} \left(\sqrt{z_i(h) + B} |v_i(h)(b)|^2 + \sqrt{z_i(h)} |v_i(h)(a)|^2 \right) - z_i(h) + \|hv'_i(h)\|^2 \right),$$

et on obtient la relation sur la partie imaginaire de la résonance :

$$\operatorname{Im}(z_i(h)) = -h \operatorname{Re}(\sqrt{z_i(h) + B} |v_i(h)(b)|^2 - \sqrt{z_i(h)} |v_i(h)(a)|^2),$$

qui est négative ou nulle. On ne peut avoir $|v_r(b)|^2 + |v_r(a)|^2 = 0$, auquel cas, à cause des conditions mixtes homogènes définissant le domaine de $H(z_i(h); h)$, $v_i(h)$ serait la solution d'un problème de Cauchy standard avec données initiales en a nulles, et donc serait identiquement nulle, ce qui n'est pas. Cela démontre la proposition. ■

15.4.3 Minoration de la partie imaginaire

■ **15.23. Proposition.** Soit $\lambda \in \mathcal{E}_{\text{rés}}$ et $\lambda(h)$ une valeur propre de $H_D(h)$ convergeant vers λ . Soit $z(h)$ une résonance de $H(h)$ dans la boule de rayon $\tilde{O}(e^{-2S_0/h})$ centrée en $\lambda(h)$, et $v(h)$ un état résonant normalisé associé :

$$v(h) \in D(H(z(h); h)), H(z(h); h)v(h) = z(h)v(h), \|v(h)\|_{L^2(I)} = 1.$$

Alors on a l'estimation ponctuelle suivante

$$v(h)(x) = \tilde{O}(e^{-d(x; U_R^h)/h}),$$

d désignant la distance d'Agmon pour le potentiel \mathcal{V}^h à l'énergie λ , et U_R^h l'ensemble des puits résonants à l'énergie λ .

Preuve. Le principe de la preuve est identique à celui du théorème 13.22 p.153. Supposons que $\lambda = \lambda_l \in \mathcal{E}_{\text{rés}}$, et soit $\mathcal{C}(h)$ le rectangle $[\lambda_l - \varepsilon_{l-1}; \lambda_l + \varepsilon_l] \times [-ih; ih]$. Considérons alors l'intégrale de contour :

$$\Pi_{z(h)} := \int_{\partial \mathcal{C}(h)} (H(z(h); h) - \zeta)^{-1} \frac{d\zeta}{2i\pi}, \quad (15.4.4)$$

qui définit le projecteur sur la somme des sous-espaces caractéristiques de $H(z(h); h)$ sur l'ensemble des valeurs propres entourées par $\mathcal{C}(h)$. D'après le théorème 15.16 p. 190 appliqué avec $\zeta = z(h)$, on sait que dans $\Omega(\varepsilon_*; h)$, le spectre de $H(z(h); h)$

est discret et constitué de valeurs propres. L'image de ce projecteur contient en particulier la direction propre définie par $v(h)$. Avec la proposition 15.14 p. 185 appliquée avec $\zeta = z(h)$, on obtient la relation

$$\Pi_{z(h)} = - \int_{\partial \mathcal{C}(h)} E^+(z(h), \zeta; h) E^{-+}(z(h), \zeta; h)^{-1} E^-(z(h), \zeta; h) \frac{d\zeta}{2i\pi}, \quad (15.4.5)$$

et d'après l'expression en série perturbative des éléments matriciels ci-dessus, on obtient, similairement à (16.3.7) p. 209 l'estimation en norme d'opérateurs

$$\Pi_{z(h)} = \chi E_0^+ E_0^- \psi \varphi + \tilde{O}(e^{-S_0/2h}), \quad (15.4.6)$$

qui dit en particulier que

$$\vec{d}(\text{Im } \Pi_{z(h)}, \text{Im } \Pi_D(h)) = \vec{d}(\text{Im } \Pi_D(h), \text{Im } \Pi_{z(h)}) = \tilde{O}(e^{-S_0/2h}), \quad h \rightarrow 0. \quad (15.4.7)$$

Soit maintenant $X\Phi := \text{Vect}\{\chi\phi_1(h) \dots \chi\phi_n(h)\}$ où les ϕ_i engendrent le sous-espace de Dirichlet $\text{Im } E_0^+ E_0^- = \text{Im } \Pi_D(h)$ (ainsi $n = m(\lambda)$). On alors le

■ **15.24. Lemme.** *Pour $h > 0$ assez petit, la restriction de $\Pi_{z(h)}$ à $X\Phi$ est surjective.*

Preuve. Appliquer l'inégalité triangulaire sur \vec{d} à partir de (15.4.7) et d'une comparaison immédiate entre $\text{Im } \Pi_D(h) = \text{Vect}\{\phi_1(h) \dots \phi_n(h)\}$ et $X\Phi$. Utiliser pour cela la décroissance des fonctions propres. ■

Il existe donc, puisque $\|v(h)\|_{L^2(I)} = 1$ et que les $\chi\phi_i(h)$ sont quasi-orthonormés des nombres complexes $\alpha_i(h)$ uniformément bornés tels que

$$v(h) = \sum_{i=1}^n \alpha_i(h) \Pi_{z(h)} \chi\phi_i(h). \quad (15.4.8)$$

On écrit ensuite

$$v(h) = \sum_{i=1}^n \alpha_i(h) [\chi\phi_i(h) - (Id - \Pi_{z(h)}) \chi\phi_i(h)]. \quad (15.4.9)$$

Le premier terme entre crochets vérifie clairement l'estimation de la proposition (décroissance des fonctions propres). Quant au second, on l'écrit sous forme intégrale :

$$(Id - \Pi_{z(h)}) \chi\phi_i(h) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\partial \mathcal{C}(h)} (z_i(h) - \zeta)^{-1} (\zeta - H(z(h); \zeta))^{-1} [p(h), \chi] \phi_i(h) d\zeta. \quad (15.4.10)$$

On conclut en remarquant que l'intégrande est localisée près du bord et encore avec les estimations de décroissance. ■

15.25. Remarque. Tout comme pour le problème de Dirichlet, une application des méthodes d'énergie d'Agmon donnerait l'estimation de la proposition, avec toutefois U_R^h remplacé par U^h , ce qui est moins bon (utiliser les conditions au bord vérifiées par $v(h)$ ainsi que l'injection $H^1 \subset L^\infty$ pour absorber les termes de bord par la norme H^1 de $e^{\varphi/h}v(h)$).

■ **15.26. Notation.** Pour une énergie résonante λ fixée, on appelle

$$S_U := \max_{\substack{i \neq j \\ i, j \in J(\lambda)}} d(c_i; c_j), \quad S_I := d(a; b)$$

les diamètres d'Agmon de l'ensemble des puits résonants à l'énergie λ , et le diamètre d'Agmon de l'île.

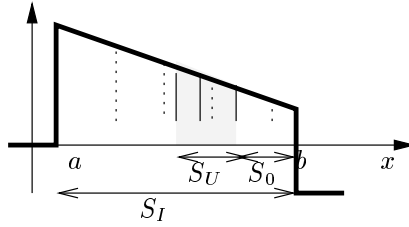


Figure 15.5. Puits résonants (traits pleins) et puits non résonants (en pointillés) à l'énergie λ .

■ **15.27. Théorème.** Soit $z(h)$ une résonance convergeant vers l'énergie résonante $\lambda \in \mathcal{E}_{rés}$. Alors il existe une constante $C > 0$ indépendante de h telle que pour $h > 0$ assez petit

$$-Im(z(h)) \geq Ce^{-2(S_0 + S_U)/h}.$$

15.28. Remarque. La quantité $S_0 + S_U$ peut s'interpréter comme la distance du bord de l'île au puits résonant le plus éloigné du bord.

Preuve. Pour un état résonant associé $v(h)$ normalisé L^2 , on a d'après un calcul déjà rencontré (proposition 15.22 p 191) :

$$-Im z(h) = hRe(\sqrt{z(h) + B})|v(h)(b)|^2 + hRe(\sqrt{z(h)})|v(h)(a)|^2. \quad (15.4.11)$$

Noter que $Re(\sqrt{z(h) + B})$ et $Re(\sqrt{z(h)})$ sont non nuls. En outre, la fonction $v(h)$ vérifie le problème aux limites :

$$\begin{cases} -h^2 v(h)'' + (\mathcal{V}^h - z(h))v(h) = 0, & x \in I \\ hv'(h)(a) + i\sqrt{z(h)}v(h)(a) = 0 \\ hv'(h)(b) - i\sqrt{z(h) + B}v(h)(b) = 0. \end{cases} \quad (15.4.12)$$

et noter que l'on a par unicité de Cauchy $v(h)(a) \cdot v(h)(b) \neq 0$.

L'idée est ensuite simple : si la partie imaginaire de la résonance est trop petite, v satisfait un problème de Cauchy avec conditions initiales voisines de zéro à cause de l'homogénéité des conditions aux limites. Sa norme L^2 ne peut alors être égale à 1 d'après la dépendance continue de la solution par rapport à la donnée initiale. Cela se quantifie par le lemme de Grönwall. On pose donc

$$F(x) := \begin{pmatrix} v(h)(x) \\ hv'(h)(x) \end{pmatrix},$$

et F satisfait le système différentiel

$$ih \frac{dF}{dx} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -(\mathcal{V}^h - z(h)) & 0 \end{pmatrix} F(x) \equiv A(x; h)F(x). \quad (15.4.13)$$

Munissant \mathbb{C}^2 de la norme ℓ^2 : $\|X\|_{\ell^2}^2 = |x_1|^2 + |x_2|^2$, on a par suite :

$$\|hF'(x)\|_{\ell^2}^2 \leq \rho \left({}^t \overline{A(x; h)} A(x; h) \right) \|F(x)\|_{\ell^2}^2, \quad (15.4.14)$$

la norme ℓ^2 de $A(x; h)$ n'étant rien d'autre que la racine du rayon spectral de ${}^t \overline{A(x; h)} A(x; h)$. Appliquant le lemme de Grönwall, on obtient la majoration valable pour tout $x \in I$:

$$\|F(x)\|_{\ell^2} \leq \min \left\{ \|F(a)\|_{\ell^2} e^{\int_a^x |\mathcal{V}^h - z(h)|^{1/2} dt/h} \|F(b)\|_{\ell^2} e^{\int_x^b |\mathcal{V}^h - z(h)|^{1/2} dt/h} \right\}. \quad (15.4.15)$$

Remplaçant $F(a)$ et $F(b)$ par leurs valeurs, la dernière inégalité se récrit :

$$\begin{aligned} \|F(x)\|_{\ell^2}^2 \leq \min & \left\{ |v(h)(a)|^2 (1 + |z(h)|) e^{2/h \int_a^x |\mathcal{V}^h - z(h)|^{1/2} dt} \right. \\ & \left. |v(h)(b)|^2 (1 + |z(h) + B|) e^{2/h \int_x^b |\mathcal{V}^h - z(h)|^{1/2} dt} \right\}. \end{aligned} \quad (15.4.16)$$

D'après la proposition précédente, on sait que $v(h)$ se concentre dans les puits résonants. Comme $\|v(h)\|_{L^2(I)} = 1$, il existe un entier $r \in \{1 \dots N\}$ tel que la norme L^2 de $v(h)$ en restriction à $U_r^h := [c_{i_r} - h; c_{i_r} + h]$ est au moins égale à $1/N$. Intégrons alors l'inégalité précédente sur U_r^h . Cela donne

$$\begin{aligned} 1/N \leq \min & \left\{ |v(h)(a)|^2 (1 + |z(h)|) \int_{U_r^h} e^{2/h \int_a^x |\mathcal{V}^h - z(h)|^{1/2} dt/h} dx \right. \\ & \left. |v(h)(b)|^2 \int_{U_r^h} e^{2/h \int_x^b |\mathcal{V}^h - z(h)|^{1/2} dt/h} dx \right\}. \end{aligned} \quad (15.4.17)$$

Puisque la fonction sous l'intégrale en x est continue, on a :

$$h^{-1} \int_{c_{i_r}-h}^{c_{i_r}+h} e^{2/h \int_{\bullet}^x |\mathcal{V}^h - z(h)|^{1/2} dt/h} dx = 2e^{2/h \int_{\bullet}^x |\mathcal{V}^h - z(h)|^{1/2} dt/h} + o(1), \quad h \rightarrow 0. \quad (15.4.18)$$

Ensuite, on note que $z(h)$ tend vers λ , et que les puits quantiques sont de diamètre euclidien $2h$: on peut remplacer *modulo* une constante multiplicative $|\mathcal{V}^h - z(h)|^{1/2}$ par $\sqrt{(\mathcal{V}^h - \lambda)_+}$ dans l'estimation (15.4.17). Cela donne donc pour une certaine constante $C > 0$

$$h|v(h)(a)|^2, h|v(h)(b)|^2 \geq Ce^{-2(S_0 + S_U)/h}, \quad h \rightarrow 0, \quad (15.4.19)$$

et on conclut avec (15.4.11) ■

15.29. Remarque.

1. Cette estimation est assez grossière car elle fait intervenir le puits résonant le plus éloigné du bord de l'île. Néanmoins, dans le cas où la multiplicité asymptotique de λ est égale à 1, elle est excellente, puisque dans ce cas $S_U = 0$.
2. Une analyse plus précise requerrait une étude de la fraction d'état résonant présente dans chaque puits résonant. On étudiera des cas particuliers au chapitre 18.

15.5 Norme de la résolvante aux conditions transparentes

Avec l'écriture fournie par le problème de Grushin, cette estimation consiste essentiellement en celle de la partie méromorphe :

■ **15.30. Proposition.** Soit $l \in \{1 \dots r\}$, $\lambda_l \in \mathcal{E}_{rés}$, et $\lambda \in \omega_l(h) \cap \mathbb{R}$. Soit $\mathcal{Z}(h) := \{z_1(h) \dots z_{m(\lambda_l)}(h)\}$ les résonances convergeant vers λ_l , (répétées avec multiplicité). Alors on a l'estimation uniforme en λ

$$\|E^{-+}(\lambda)^{-1}\| = \tilde{O} \left(e^{(m(\lambda_l)-1)S_U/h} \frac{1}{\text{dist}(\lambda; \mathcal{Z}(h))} \right),$$

le symbole dist désignant la distance euclidienne usuelle.

Preuve. Rappelons que l'on a établi (cf. (15.3.29) p.189) l'estimation uniforme en λ

$$E^{-+}(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda - \lambda_1(h) & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda - \lambda_{m(\lambda)}(h) \end{pmatrix} + F(\lambda; h), \quad (15.5.1)$$

la fonction matricielle $F(\lambda; h)$ étant holomorphe et ses coefficients vérifiant :

$$\forall i, j \in \{1 \dots m(\lambda_l)\}, \quad |F_{i,j}(\lambda; h)| = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-2S_0/h}\right), \quad (15.5.2)$$

et que les valeurs singulières de la matrice E^{-+} sont les $z_i(h)$. On écrit sous la forme plus explicite suivante l'inverse :

$$E^{-+}(\lambda)^{-1} = \frac{1}{\det E^{-+}(\lambda)} \text{com}^T(E^{-+}(\lambda)) \quad (15.5.3)$$

où $\text{com}^T(E^{-+}(\lambda))$ désigne la transposée de la matrice des cofacteurs.

■ **15.31. Lemme.** *Il existe une fonction holomorphe $f(z; h)$ définie sur $\omega_l(h)$ telle que pour tout $z \in \omega_l(h)$ on ait*

$$\det E^{-+}(z) = \prod_{i=1}^{m(\lambda)} (z_i(h) - z) f(z; h),$$

et avec

$$m := \inf_{h>0} \inf_{z \in \omega_l(h)} |f(z; h)| > 0.$$

Preuve. On sait que dans $\omega_l(h)$ les seuls zéros de la fonction holomorphe $z \mapsto \det E^{-+}(z)$ sont les $z_i(h)$. La fonction

$$f(z; h) := \det E^{-+}(z) / \prod_{i=1}^{m(\lambda)} (z_i(h) - z)$$

est donc méromorphe sur $\omega_l(h)$ avec singularités effaçables et sans zéros, ce qui donne la première partie du lemme. Par suite, l'inverse définit une fonction holomorphe sur $\omega_l(h)$. On lui applique alors le principe sur maximum. Sur le bord de $\omega_l(h)$, reprenant (15.4.2) p.190, et la majoration des résonances (corollaire 15.18 p.191) on obtient successivement

$$\begin{aligned} \det E^{-+}(z) &= \prod_{i=1}^{m(\lambda_l)} (z - \lambda_i(h)) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}) \\ &= \prod_{i=1}^{m(\lambda_l)} (z - z_i(h)) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}), \end{aligned}$$

et comme sur $\partial\omega_l(h)$, $|z - z_i(h)| \geq C \cdot h$, on obtient la deuxième partie du lemme. ■

On explicite à présent les cofacteurs de E^{-+} : revenant à la définition des cofacteurs et du déterminant, par homogénéité du déterminant, un cofacteur $C_{i,j}(\lambda; h)$, pour $i, j \in \{1 \dots m(\lambda_l) - 1\}$, est une somme de $(m(\lambda_l) - 1)!$ monômes homogènes d'ordre $m(\lambda_l) - 1$ de la forme

$$\prod_{s=1}^k (\lambda - \lambda_{i_s}(h) + F_{i_k, i_k}(\lambda; h)) \prod_{q=1}^{m(\lambda_l)-1-k} F_{q, \sigma(q)}(\lambda; h), \quad k = 0 \dots m(\lambda_l) - 1, \quad (15.5.4)$$

les indices i_k étant deux à deux distincts, et σ désignant une permutation sur l'ensemble $\{1 \dots m(\lambda_l) - 1\} \setminus \{i_1 \dots i_k\}$. Ainsi une première majoration fournit que chaque terme est contrôlé par

$$\prod_{s=1}^k (\lambda - z_{i_s}(h) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})) \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2(m(\lambda_l)-1-k)S_0/h}). \quad (15.5.5)$$

Prenons ensuite par exemple comme norme matricielle d'une matrice A le maximum des normes ℓ^1 des lignes de A . D'après (15.5.3), il s'agit donc de majorer un terme de la forme

$$\vartheta(\lambda; h) := \frac{\prod_{s=1}^k (\lambda - z_{i_s}(h) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}))}{\prod_{i=1}^{m(\lambda)} (\lambda - z_i(h)) f(\lambda; h)} \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2(m(\lambda_l)-1-k)S_0/h}). \quad (15.5.6)$$

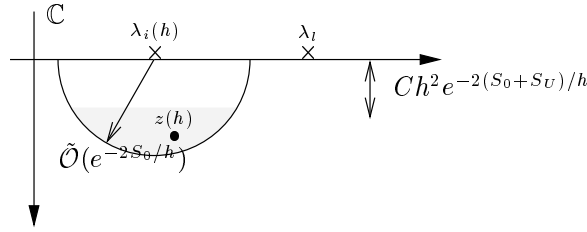


Figure 15.6. Les résonances sont confinées dans la région en gris.

On apparie un facteur $(\lambda - z_{i_s}(h) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}))$ par le facteur $(\lambda - z_{i_s}(h))$ apparaissant au dénominateur en écrivant

$$\frac{(\lambda - z_{i_s}(h) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}))}{(\lambda - z_{i_s}(h))} = 1 + \frac{\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})}{(\lambda - z_{i_s}(h))}, \quad (15.5.7)$$

et avec la minoration des résonances, on obtient (théorème 15.27) :

$$\frac{(\lambda - z_{i_s}(h) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}))}{(\lambda - z_{i_s}(h))} = 1 + \frac{\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})}{Ch^2 e^{-2(S_0+S_U)/h}} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{2S_U/h}). \quad (15.5.8)$$

Quant aux autres facteurs du dénominateurs, on peut également en minorer $m(\lambda_l) - 1 - k$ en les appariant avec le facteur par $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2(m(\lambda_l)-1-k)S_0/h})$; il reste au dénominateur un facteur de la forme $\lambda - z(h)$, ce qui donne finalement

$$|\vartheta(\lambda; h)| = \tilde{\mathcal{O}} \left(\frac{e^{(m(\lambda_l)-1)S_U/h}}{\min_{z \in \mathcal{Z}(h)} |\lambda - z|} \right), \quad (15.5.9)$$

et finit de prouver la proposition. ■

Fonctions de l'énergie

On dispose d'après les résultats du chapitre 14 d'un renseignement qualitatif assez précis sur densité d'états locale dans le cas du puits complètement bouché (corollaire 14.8 p. 166) : à savoir que cette dernière converge (à extraction près) vers une mesure atomique chargeant le bord de l'île, ce qui est cohérent avec l'image classique, puisque l'intérieur de l'île est une région interdite aux énergies considérées. Par ailleurs, l'introduction de puits quantiques modifie sensiblement la situation : du point de vue spectral d'une part, celle-ci génère des pôles pour [le prolongement méromorphe de] la résolvante (les résonances), et du point de vue géométrique d'autre part, elle entraîne l'existence "d'états bornés" localisés dans les puits. L'application de la formule de Stone fera apparaître ces deux aspects : ils sont contenus dans le développement en série perturbative de la résolvante de $H(h)$ de la proposition 15.14. Il est explicité dans la section 16. 2. Noter enfin que la formule de Stone, comme représentation intégrale des fonctions du Hamiltonien, met en jeu des quantités holomorphes. Le calcul de fonctions de l'énergie consiste essentiellement en un calcul de résidu¹³.

16.1 Situation de départ

Concentrons-nous dans un petit domaine d'énergie autour d'une énergie résonante λ_0 et soit $\Phi_0 := \text{Vect}\{\phi_1(h), \dots, \phi_n(h)\}$ le sous-espace spectral de $H_D(h)$ sur ce domaine d'énergie. Si l'on note $H_D^0(h)$ la restriction de $H_D(h)$ à Φ_0 et que l'on revient aux calculs de la section 2 du chapitre précédent, on a pour le problème

¹³Noter d'ailleurs que sur le spectre discret d'un opérateur auto-adjoint, le projecteur spectral est obtenu comme résidu de la résolvante

de Dirichlet et $z \in \mathbb{C}$, $z \notin \sigma(H_D(h))$:

$$(H_D^0 - z)^{-1} = -E_0^- E_0^{-+}(z)^{-1} E_0^+ = \sum_{i=1}^n \frac{1}{z - \lambda_i} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|,$$

et donc pour $\varepsilon > 0$, $\varepsilon \rightarrow 0$, on obtient

$$\begin{aligned} (H_D^0 - \lambda - i\varepsilon)^{-1} - (H_D^0 - \lambda + i\varepsilon)^{-1} &= \sum_{i=1}^n \frac{2i\varepsilon}{(\lambda - \lambda_i)^2 + \varepsilon^2} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \\ &\xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} n\pi \delta_{\lambda=\lambda_0} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|, \end{aligned}$$

qui n'est qu'un cas particulier de la formule de Stone.

Avec l'approche perturbative envisagée pour l'étude de $H(h)$, on espère aboutir à une formule similaire. C'est en effet le cas puisque

■ 16.1. Théorème. *Pour λ dans $\mathcal{I}(\varepsilon_*)$ la densité spectrale de $H(h)$ sur I est donnée par :*

$$\mathbb{1}_I \frac{\partial E}{\partial \lambda}(\lambda; h) \mathbb{1}_I = \frac{1}{2i\pi} \left[(H(\lambda; h) - \lambda)^{-1} - \left((H(\lambda; h) - \lambda)^{-1} \right)^* \right].$$

De plus, à $h > 0$ fixé, et pour tout $\lambda \in \mathcal{I}(\varepsilon_)$, $\mathbb{1}_I \partial E / \partial \lambda(\lambda; h) \mathbb{1}_I$ est un opérateur de type Hilbert-Schmidt et de norme localement uniformément bornée en λ .*

Preuve. Soit $\lambda \in \mathcal{I}(\varepsilon_*)$ et appliquons les propositions 7.5 et 7.8. Cela donne pour $\varepsilon > 0$ assez petit, $h > 0$ étant fixé :

$$\begin{aligned} \mathbb{1}_I [(H(h) - (\lambda + i\varepsilon))^{-1} - (H(h) - (\lambda - i\varepsilon))^{-1}] \mathbb{1}_I &= (H(\lambda + i\varepsilon; h) - \lambda)^{-1} \\ &\quad - (H'(\lambda - i\varepsilon; h) - \lambda)^{-1}. \end{aligned}$$

Il ne reste plus qu'à faire tendre ε vers 0, et à appliquer le corollaire 7.10 du principe d'absorption limite, la limite existant dans la norme Hilbert-Schmidt. ■

On dispose donc, *via* l'expression du théorème 16.1 d'un moyen de calculer la densité d'états locale.

16.2. Remarque. La partie polaire de la fraction rationnelle ci-dessus (à valeurs opérateurs) fait intervenir des singularités, qui sont les résonances $z_i(h)$ et qui apparaissent sous la forme :

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda - z_i(h)} - \frac{1}{\lambda - \bar{z}_i(h)} = \sum_{i=1}^n \frac{2i \operatorname{Im} z_i(h)}{(\lambda - \operatorname{Re} z_i(h))^2 + (\operatorname{Im} z_i(h))^2}. \quad (16.1.1)$$

D'après le corollaire 15.18 p.191, la mesure spectrale devrait faire apparaître une densité limite quand $h \rightarrow 0$ en

$$\sum_{i=1}^n \pi \delta_{\lambda=\lambda_i},$$

et qui est une forme approché de la situation de départ. C'est cet argument que l'on va mettre en forme dans le calcul de la densité d'états locale.

16.3. Remarque. La mise en évidence de cette densité en énergie est établie dans le cas particulier du théorème 18.5 p. 233.

Énonçons le résultat relatif à la densité d'états locale, qui sera démontré dans la section 16.3.

■ **16.4. Théorème.** *Pour toutes fonctions $\theta \in C_c(\Lambda_*; \Lambda^*)$ et $\varphi \in C^0([a; b])$, les traces locales $\text{Tr} [\theta(H(h))\varphi]$ sont bien définies, la famille de mesures $\{dn_\theta[H(h)]\}_{h>0}$ est bornée. Soit dn_θ une valeur d'adhérence. Alors pour toute fonction $\varphi \in C^0([a; b])$, on a*

$$\int_a^b \varphi(x) dn_\theta(x) = \sum_{\lambda \in \mathcal{E}_{\text{rés}}} \sum_{i \in J(\lambda)} \theta(\lambda) \varphi(c_i) + L_\lambda(\theta) L_x(\varphi)$$

où L_λ et L_x sont des mesures bornées positives respectivement sur $[\Lambda_*; \Lambda^*]$, et I . Enfin la mesure L_x est dominée par la mesure $\mu_{\partial I}$ superficielle sur ∂I .

16.5. Remarque.

1. Rappelons que les traces locales sont bien définies en vertu de la proposition 10.6 p.104.
2. Dit autrement, la mesure $dn_\theta[H^h]$ converge faiblement (quitte à extraire) et

$$\int \varphi(x) dn_\theta[H^h] \xrightarrow{h \rightarrow 0} \sum_{\lambda_{\text{rés}} \in \mathcal{E}_{\text{rés}}} \sum_{i \in J(\lambda_{\text{rés}})} \langle \delta_{\lambda=\lambda_{\text{rés}}} \otimes \delta_{x=c_i}; \theta \otimes \varphi \rangle + \langle L_\lambda \otimes L_x, \theta \otimes \varphi \rangle.$$

À présent, fixons la fonction θ supportée dans $]\Lambda_*; \Lambda^*[$, et $\varphi \in C_c^0(I)$ positive. Comme $\theta(H(h))\varphi = [\theta(H(h))\mathbb{1}_I\varphi] \cdot \mathbb{1}_I$, par cyclicité de la trace, on a

$$\text{Tr} [\theta(H(h))\varphi] = \text{Tr} [\mathbb{1}_I\theta(H(h))\mathbb{1}_I\varphi]. \quad (16.1.2)$$

On travaillera donc désormais avec l'opérateur $\mathbb{1}_I \theta(H(h)) \mathbb{1}_I \varphi$. D'après le calcul fonctionnel, on a

$$\mathbb{1}_I \theta(H(h)) \mathbb{1}_I \varphi = \mathbb{1}_I \int_{\mathbb{R}} \theta(\lambda) \frac{\partial E}{\partial \lambda}(\lambda; h) d\lambda \cdot \mathbb{1}_I \varphi \quad (16.1.3)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{\mathbb{R}} \theta(\lambda) \mathbb{1}_I \frac{\partial E}{\partial \lambda}(\lambda; h) \mathbb{1}_I \varphi d\lambda, \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathbb{R}} \theta(\lambda) [(H(\lambda + i\varepsilon; h) - \lambda - i\varepsilon)^{-1} \\ &\quad - (H'(\lambda - i\varepsilon; h) - \lambda + i\varepsilon)^{-1}] \varphi d\lambda, \end{aligned} \quad (16.1.4)$$

l'intégrale pouvant être comprise au sens de la norme sur $\mathcal{L}_c(L^2(\mathbb{R}))$ d'après le théorème 16.1 (ce qui justifie la dernière manipulation).

16.2 Forme précisée

Le calcul des traces locales $\text{Tr} [\theta(H(h)) \varphi]$ de $H(h)$, peut se faire sur des sous-intervalles recouvrant $[\Lambda_*; \Lambda^*]$:

■ **16.6. Hypothèse.** On fixe une énergie résonante $\lambda_l \in [\Lambda_*; \Lambda^*]$, et on considère $\mathcal{I}_l := [\lambda_l - 2\varepsilon_{l-1}; \lambda_l + 2\varepsilon_l]$, de sorte que $\mathcal{I}(\varepsilon_*) \subset \bigcup_{l=1}^r \mathcal{I}_l$.

D'après les propriétés du problème de Grushin, et la proposition 15.14 appliquée avec $z \in \omega_l(h)$, $\zeta = z$, et les notations 15.15 p.186, on a :

$$\forall z \in \omega_l(h), \quad [H(z; h) - z]^{-1} = E(z; h) - E^+(z; h) E^{-+}(z; h)^{-1} E^-(z; h), \quad (16.2.1)$$

les coefficients $E^\bullet(z; h)$ étant ceux de la matrice $\mathcal{H}(z; z; h)^{-1}$. Toujours d'après la proposition 15.14 et les estimations de la proposition 15.11, on a en outre :

$$\mathcal{H}(z; h)^{-1} = \mathcal{F}(z; h)(1 + \epsilon(z; h)), \quad \|\epsilon(z; h)\| = \tilde{O}(e^{-S_0/2h}), \quad (16.2.2)$$

la matrice $\mathcal{F}(z; h)$ est donnée par (15.3.4). Cela permet de récrire l'égalité ci-dessus, en introduisant les coefficients de la matrice ϵ , de façon plus explicite :

$$\begin{pmatrix} E(z; h) & E^+(z; h) \\ E^-(z; h) & E^{-+}(z; h) \end{pmatrix} = \mathcal{F}(z; h) \begin{pmatrix} 1 + \epsilon(z; h) & \epsilon^+(z; h) \\ \epsilon^-(z; h) & 1 + \epsilon^{-+}(z; h) \end{pmatrix},$$

avec

$$\epsilon(z; h) = \begin{pmatrix} \tilde{O}(e^{-S_0/2h}) & \tilde{O}(e^{-S_0/h}) \\ \tilde{O}(e^{-S_0/2h}) & \tilde{O}(e^{-2S_0/h}) \end{pmatrix}.$$

Revenant à la définition de la matrice \mathcal{F} et en explicitant le développement en série de la prop. 15.14 p.185, on obtient avec les estimations de la proposition 15.11 p.180

$$E(z; h) = (H_{NR}(z, h) - z)^{-1}(1 - \psi)(1 + \varepsilon) + \chi E_0(z)\psi(1 + \varepsilon) + \chi E_0^+ \varepsilon^- \quad (16.2.3)$$

$$E^+(z; h) = \chi E_0^+ + (H_{NR}(z, h) - z)^{-1}(1 - \psi)\varepsilon^+ + \chi E_0^+ \varepsilon^{-+} + \chi E_0 \psi \varepsilon^+ \quad (16.2.4)$$

$$E^-(z; h) = E_0^- \psi + E_0^- \psi \varepsilon + E_0^{-+} \varepsilon^- \quad (16.2.5)$$

$$E^{-+}(z; h) = E_0^{-+}(z) + \tilde{O}(e^{-2S_0/h}). \quad (16.2.6)$$

Les estimations étant uniformes dans $\omega_l(h)$, et dans chaque coefficient on a mis en premier le terme principal.

16.7. Remarque. Avec ces expressions ainsi développées, la formule (16.2.1) s'interprète de la manière suivante : la résolvante de $H(h)$ en restriction à I se décompose en :

1. une partie régulière, à savoir

$$(H_{NR}(z, h) - z)^{-1}(1 - \psi) + \chi E_0(z)\psi,$$

puisqu'il sur un voisinage complexe de \mathcal{I}_l , c'est une fonction holomorphe.

2. une partie polaire de rang fini. Celle-ci est exponentiellement proche du projecteur sur les états propres du problème de Dirichlet $E_0^+ (E_0^{-+})^{-1} E_0^-$, pour peu que z soit assez loin, d'après (16.2.6), des pôles de $(E_0^{-+})^{-1}$ et $(E^{-+})^{-1}$. On va voir que l'on peut se ramener à cette hypothèse, le calcul de fonctions de $H(h)$ se ramenant à un calcul de résidus.
3. Noter enfin que cette décomposition, tout comme pour le problème de Dirichlet, correspond à une décomposition en sous-espaces transverses de l'espace de Hilbert.

16.3 Preuve du théorème 16.4

La preuve consiste à interpréter la formule de Stone (16.1.4) écrite pour $H(h)$ comme une intégrale de contour sur un ouvert du revêtement de $\mathbb{C} \setminus \sigma(H(h))$ d'une fonction holomorphe. Ce contour sera pris homotope à un cycle entourant les résonances et évitant les anti-résonances.

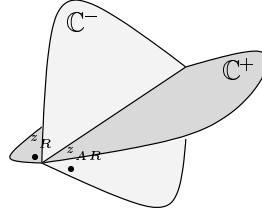


Figure 16.1. Les résonances (pôles de $(H(z, h) - z)^{-1}$) ainsi que les anti-résonances (pôles de $(H'(z, h) - z)^{-1}$) sont sur le second feuillet.

16.3.1 Lemmes préparatoires

Il sera utile dans la suite de se ramener au problème du puits complètement bouché. Cela a été fait dans la proposition 14.17, en (14.3.9) :

$$\begin{aligned} (H^{NR}(z, h) - z)^{-1} &= [(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}(1 - \tilde{\psi}) \\ &\quad + \chi(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\tilde{\psi}][1 + \mathcal{O}(e^{-S_{NR}/h})] \end{aligned} \quad (16.3.1)$$

■ **16.8. Lemme.** Soit $\varphi \in C_c^0([a; b[)$. Pour $z \in \Omega(\varepsilon_*; h)$ et $h > 0$ assez petit, l'opérateur $(\tilde{H}(z; h) - z)^{-1}\varphi$ est à trace et on a l'estimation uniforme

$$\|(\tilde{H}(z; h) - z)^{-1}\varphi\|_1 = \mathcal{O}(h^{-2}).$$

Preuve. On écrit que pour tout $z \in \Omega(\varepsilon_*; h)$

$$\begin{aligned} \varphi(\tilde{H}(z; h) - z)^{-1} &= (H_0(h) + i)^{-1}\varphi \\ &\quad - (H_0(h) + i)^{-1}[\varphi(\tilde{\mathcal{V}}^h - (z + i))] (\tilde{H}(z; h) - z)^{-1} \\ &\quad + (H_0(h) + i)^{-1}[P(h), \varphi](\tilde{H}(z; h) - z)^{-1} \end{aligned} \quad (16.3.2)$$

$H_0(h)$ désignant le Laplacien de Dirichlet sur l'intervalle $[a; b]$. Les deux premiers termes du membre de droite sont des opérateurs à trace car l'opérateur $(H_0(h) + i)^{-1}$ l'est, avec estimation de la norme en h^{-2} (cf. fin de la preuve de la prop. 10.4 p.103). On a aussi utilisé que l'opérateur $(\tilde{H}(z; h) - z)^{-1}$ est uniformément borné par rapport à z (prop.14.2 p.160). Pour ce qui est du dernier terme du membre de droite, on utilise encore que $(H_0(h) + i)^{-1}$ est à trace tandis que l'opérateur $(\tilde{H}(z; h) - z)^{-1}$ opère continûment entre L^2 et H^1 (prop. 14.3 p.162), et cela uniformément par rapport à z . On conclut par adjonction, l'ouvert $\Omega(\varepsilon_*; h)$ étant stable par conjugaison complexe. ■

■ **16.9. Lemme.** Soit $h > 0$ et $\Omega(h) := \mathcal{I}_l \times [-h; h]$. Soit ensuite $O(h)$ l'ouvert défini par

$$O(h) := \Omega(h) \setminus [\lambda_l - 2a_l(h); \lambda_l + 2a_l(h)] \times [-h/2; h/2]. \quad (16.3.3)$$

Alors il existe $c > 0$ telle que

$$\forall z \in O(h), \quad E^{-+}(z)^{-1} = E_0^{-+}(z)^{-1} + G(z) \quad (16.3.4)$$

G désignant une fonction méromorphe vérifiant uniformément par rapport à z .

$$\|G(z)\| = \mathcal{O}(e^{-c/h}).$$

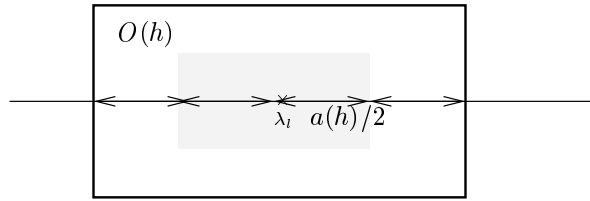


Figure 16.2. Sur $O(h)$, la série de Neumann 16.3.5 est convergente.

Preuve. Fixons n'importe quelle norme matricielle \mathbb{C}^n . Par monotonie de la distance d'Agmon par rapport à l'énergie, l'estimation (16.2.6) est valable en prenant S_0 égale à la distance d'Agmon pour l'énergie Λ_* . Avec $\eta = S_0/2 > 0$, on a donc uniformément en z dans $I_l \times [-h; h]$

$$\begin{aligned} E^{-+}(z) &= E_0^{-+}(z) + R(z), \quad \text{avec} \quad \|R(z)\| \leq Ce^{-S_0/h} \\ &= (1 + R(z)E_0^{-+}(z)^{-1})E_0^{-+}(z), \quad \forall z \in \Omega(h), \quad z \neq \lambda_i(h), \end{aligned}$$

de sorte que par prolongement analytique

$$E^{-+}(z)^{-1} = E_0^{-+}(z)^{-1} [(1 + R(z)E_0^{-+}(z)^{-1})^{-1}], \quad \forall z \in \Omega(h), \quad z \neq z_i(h). \quad (16.3.5)$$

Le terme entre crochets est une fonction méromorphe avec comme zéros les $z = \lambda_i(h)$ et comme pôles les $z = z_i(h)$. On obtient alors pour $z \notin O(h)$, et d'après l'expression de $E_0^{-+}(z)^{-1}$:

$$\|R(z)E_0^{-+}(z)^{-1}\| \leq \|R(z)\| \min_{i \in J(\lambda_l)} |\lambda_i(h) - z|^{-1}.$$

Or on a

$$\forall i \in J(\lambda_l), \quad |z - \lambda_i(h)| \geq |z - \lambda_l| - |\lambda_l - \lambda_i(h)| \geq 2a_l(h) - a(h) \geq h/2.$$

Ainsi, pour $h > 0$ assez petit, on peut utiliser la représentation en série de Neumann dans (16.3.5) pour obtenir pour tout $z \in O(h)$

$$(1 + R(z)E_0^{-+}(z)^{-1})^{-1} = 1 + F(z),$$

et le terme F est une fonction matricielle *méromorphe* satisfaisant l'estimation

$$\|F(z)\| \leq \frac{\|R(z)E_0^{-+}(z)^{-1}\|}{1 - \|R(z)E_0^{-+}(z)^{-1}\|} = \mathcal{O}(e^{-S_0/h}/h),$$

qui donne, combinée avec (16.3.5)

$$\forall z \in O(h), \quad E^{-+}(z)^{-1} = E_0^{-+}(z)^{-1} + G(z) \quad (16.3.6)$$

où cette fois encore G désigne une fonction *méromorphe* vérifiant

$$\|G(z)\| = \mathcal{O}(e^{-S_0/2h}), \quad z \in O(h).$$

■

Le lemme suivant est classique, on se contentera de le citer :

■ **16.10. Lemme.** *Soit $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$, deux espaces de Hilbert, et A, B deux opérateurs bornés tels que*

$$B : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2, \quad A : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1.$$

Supposons que B est de rang fini de N . Alors l'opérateur AB est à trace et

$$|AB|_1 \leq N\|A\|\|B\|.$$

16.3.2 Résidus

On peut à présent expliciter le calcul de (16.1.3) pour aboutir au théorème. Puisque pour toute fonction $\varphi \in C_c(I)$ positive, la fonctionnelle $\theta \mapsto \text{Tr}[\theta(H(h))\varphi]$ définit une mesure positive (cf. remarque 10.7 p.248), il suffit par densité des fonctions polynomiales sur \mathcal{I}_l de calculer son action sur ces fonctions, qui sont holomorphes, sur un voisinage complexe de \mathcal{I}_l . On supposera donc que θ est une fonction polynomiale sur \mathcal{I}_l .

En outre, puisque l'on sait que la mesure $\varphi \mapsto \text{Tr}[\theta(H(h))\varphi]$ est bornée, on peut se contenter d'étudier la mesure sur l'ouvert $]a; b[$, le bord de l'île consistant en la réunion de deux points. Dans la suite, on supposera donc que φ est une fonction positive à support compact dans $]a; b[$.

Puisque $(H'(z; h) - z)^{-1}$ désigne le prolongement méromorphe de la résolvante depuis le demi-plan $\text{Im } z < 0$, il revient au même de considérer (16.1.4)

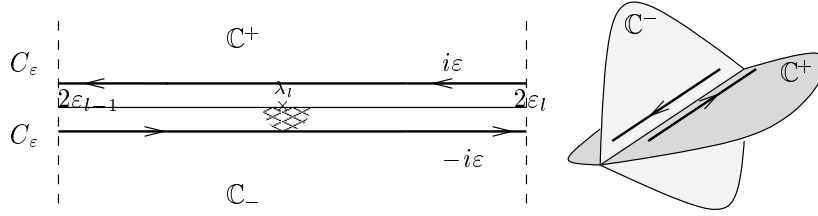


Figure 16.3. L'application de la formule de Stone conduit à considérer l'intégrale du prolongement méromorphe de la résolvante sur le revêtement. Dans la zone hachurée, les résonances (sur le second feuillet), exponentiellement proches du contour limite ($\varepsilon \rightarrow 0$) lorsque $h \rightarrow 0$.

comme l'intégrale du prolongement sur le revêtement à deux feuillets de $\mathbb{C} \setminus]-\infty; B]$, sur le contour de la figure 16.3.

On effectue alors la déformation indiquée sur la figure suivante 16.4.

On a

$$\forall z \in \omega_l(h), \quad [H(z; h) - z]^{-1} = E(z; h) - E^+(z; h)E^{-+}(z; h)^{-1}E^-(z; h), \quad (16.3.7)$$

la fonction holomorphe $E(z; h)$ n'ayant pas de pôles à l'intérieur du contour $\gamma(h)$, son intégrale est nulle.

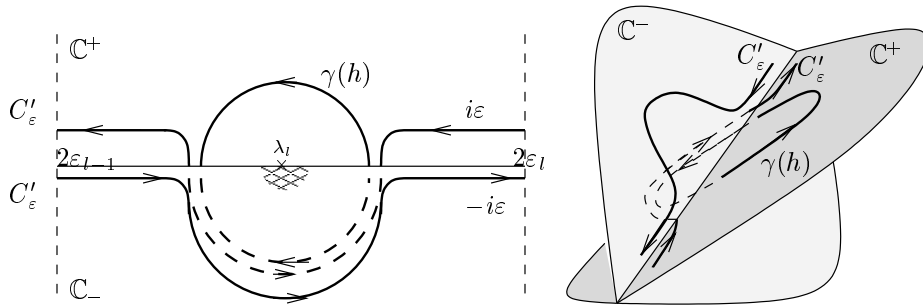


Figure 16.4. Le contour C_ε est homotope à la réunion du cercle $\gamma(h)$ centré en λ_l traversant la coupure, et du contour C'_ε , la contribution sur les arcs de cercle en pointillés étant nulle.

En outre, d'après les développements (16.2.4)-(16.2.6), en utilisant la définition des coefficients ε^\bullet , on voit qu'on a en norme d'opérateur, et uniformément par rapport à z

$$E^-(z) = E_0^-(z)\psi + \mathcal{O}(e^{-S_0/2h}), \quad E^+(z) = \chi E_0^+(z) + \mathcal{O}(e^{-S_0/2h}). \quad (16.3.8)$$

À l'aide du lemme 16.10, ces estimations sont en fait valables en norme trace.

Ensuite, on voit par choix de $\gamma(h)$, que

$$\forall z \in \gamma(h), \quad E^{-+}(z)^{-1} = E_0^{-+}(z)^{-1} + G(z), \quad (16.3.9)$$

avec

$$G(z) = \mathcal{O}(1), \quad h \rightarrow 0.$$

Revenant alors à (16.3.7), on voit en utilisant ces trois dernières estimations que

$$[H(z; h) - z]^{-1} = E(z; h) - \chi E_0^+ E_0^{-+}(z; h)^{-1} E_0^- \psi + \mathcal{O}(e^{-S_0/2h}).$$

En intégrant sur $\gamma(h)$, on trouve, utilisant que $\theta(\lambda_l) = \theta(\lambda_l(h)) + o(1)$:

$$\int_{\gamma(h)} \theta(z) [H(z; h) - z]^{-1} \varphi \frac{dz}{2i\pi} = 0 + \theta(\lambda_l) \chi E_0^+ E_0^- \psi \varphi + o(1) \|\varphi\|_\infty, \quad (16.3.10)$$

c'est-à-dire le projecteur $\Pi_D(h) = E_0^+ E_0^-$ sur l'espace des fonctions propres de Dirichlet sur $\omega_l(h) \cap \mathcal{I}(\varepsilon_*)$. Prenons la trace membre à membre : on écrit par cyclicité de la trace que

$$\begin{aligned} \text{Tr} [\chi \Pi_D(h) \psi \phi] &= \text{Tr} [\Pi_D(h) \psi \varphi \chi] \\ &= \text{Tr} [\Pi_D(h) \psi \varphi] \\ &= \sum_{j=1}^{m(\lambda_l)} \langle \phi_j(h), \phi_j(h) \psi \varphi \rangle_{L^2}. \end{aligned}$$

D'après la remarque 13.20 p.150, et en décomposant les fonctions $\phi_i(h)$ suivant les sous-espaces Ψ et Ψ^\perp , correspondant aux problèmes à un puits, on obtient à l'aide de (13.4.24)-(13.4.25)

$$\text{Tr} \int_{\gamma(h)} \theta(z) [H(z; h) - z]^{-1} \varphi \frac{dz}{2i\pi} = \theta(\lambda_l) \sum_{i=1}^{m(\lambda_l)} \varphi(c_i) + o(1) \|\varphi\|_\infty. \quad (16.3.11)$$

De même utilisant que sur la branche $C'_\varepsilon \cap \mathbb{C}_-$, l'adjoint de $E^{-+}(\bar{z})^{-1}$ est $\mathcal{O}(h^{-1})$, on obtient que pour h tendant vers 0 :

$$\int_{C'_\varepsilon \cap \mathbb{C}_-} \theta(z) [H'(z; h) - z]^{-1} \varphi \frac{dz}{2i\pi} = \mathcal{O}(e^{-c/h}) \|\varphi\|_\infty. \quad (16.3.12)$$

Il reste à calculer l'intégrale de $E(z; h)$ sur C_ε . Puisque dans le disque bordé par $\gamma(h)$, $E(z; h)$ n'a pas de pôles, le contour C'_ε est homotope à C_ε , ce qui fait que

l'on est ramené à calculer l'intégrale de $E(z; h)$ sur C_ε . Mais par définition de $E(z; h)$, on a, revenant à (16.3.1)

$$\begin{aligned} E(z; h) &= (\tilde{H}(z, h) - z)^{-1}(1 - \tilde{\psi})(1 + \tilde{\varepsilon}(z)) + \chi(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\tilde{\psi}(1 + \tilde{\varepsilon}(z)) \\ &+ \chi E_0(z)\psi(1 + \varepsilon) + \chi E_0^+ \varepsilon^- \end{aligned}$$

où les opérateurs $\tilde{\varepsilon}$ et $\tilde{\varepsilon}^-$ sont uniformément bornés par rapport à z et vérifient

$$\|\tilde{\varepsilon}(z)\|, \|\tilde{\varepsilon}^-(z)\| = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_{NR}/2h}), \quad (16.3.13)$$

pour la distance d'Agmon à l'énergie λ_{l+1} . Noter que les opérateurs $(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}$ et $E_0(z)$ sont à trace. Quant à $\chi E_0^+ \varepsilon^-$, il est $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0/2h})$ en norme trace d'après le lemme 16.10 et (16.2.2). Ensuite, on note également que pour tout z sur C_ε , les opérateurs $(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}$, $E_0(z)$ et $(\tilde{H}(z, h) - z)^{-1}$ et $E_0(z)$ sont à trace, et ceci uniformément en z : les deux premiers d'après le lemme 10.3 p.102, et le dernier d'après le lemme 16.8. Ainsi pour $\varepsilon > 0$ fixé, on a

$$\begin{aligned} \text{Tr} \int_{C_\varepsilon} \theta(z) E(z; h) \varphi dz &= \text{Tr} \int_{C_\varepsilon} \theta(z) (\tilde{H}(z, h) - z)^{-1} (1 - \tilde{\psi}) \varphi dz \\ &+ \text{Tr} \int_{C_\varepsilon} \theta(z) (\tilde{H}(z, h) - z)^{-1} (1 - \tilde{\psi}) \tilde{\varepsilon}(z) \varphi dz \\ &+ \text{Tr} \int_{C_\varepsilon} \theta(z) \chi (H_D^{NR}(h) - z)^{-1} \tilde{\psi} \varphi dz \\ &+ \text{Tr} \int_{C_\varepsilon} \theta(z) \chi (H_D^{NR}(h) - z)^{-1} \tilde{\psi} \tilde{\varepsilon}^-(z) \varphi dz \\ &+ \text{Tr} \int_{C_\varepsilon} \theta(z) \chi E_0(z) \psi \varphi dz + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0/2h}). \end{aligned} \quad (16.3.14)$$

Si maintenant $\varepsilon \rightarrow 0$, $h > 0$ étant fixé, les première, troisième et dernière intégrales convergent d'après la formule de Stone respectivement vers $\text{Tr} [\theta(\tilde{H}(h))(1 - \tilde{\psi})\varphi]$, $\text{Tr} [\theta(H_D^{NR}(h))\tilde{\psi}\varphi]$ et $\text{Tr} [\chi\theta(H_D(h)|_{\Phi^\perp})\psi\varphi]$, où Φ désigne le sous-espace spectral de $H_D(h)$ sur $[\lambda_l - 3\varepsilon_{l-1}; \lambda_l + 3\varepsilon_l]$. Il est clair que sur le support de θ , les opérateurs $H_D(h)|_{\Phi^\perp}$ et $H_D^{NR}(h)$ n'ont pas de spectre, donc

$$\theta(H_D(h)|_{\Phi^\perp}) = \theta(H_D^{NR}(h)) = 0.$$

Quant au premier terme, il suffit d'appliquer le corollaire 14.8 p. 166 : la masse de la mesure se concentre sur le bord de l'île, et par suite ce terme tend vers zéro. Enfin pour ce qui est des deux intégrales résiduelles, on majore brutalement utilisant

notamment le lemme 16.8 et (16.3.13)

$$\begin{aligned}
& \left| \text{Tr} \int_{C_\varepsilon} \theta(z) (\tilde{H}(z, h) - z)^{-1} (1 - \tilde{\psi}) \tilde{\varepsilon}(z) \varphi \right. \\
& \quad \left. + \text{Tr} \int_{C_\varepsilon} \theta(z) \chi(H_D^{NR}(h) - z)^{-1} \tilde{\psi} \tilde{\varepsilon}(z) \varphi dz \right| \\
&= \mathcal{O} \left(\sup_{z \in \omega_l(h)} \left[\|(H_D^{NR}(h) - z)^{-1}\|_1 + \|(\tilde{H}(z, h) - z)^{-1}\|_1 \right] \right) \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_{NR}/2h}) \\
&= \mathcal{O}(h^{-2} e^{-c/h}) \rightarrow 0.
\end{aligned} \tag{16.3.15}$$

Ainsi (16.3.14) tend faiblement vers 0 quand $h \rightarrow 0$. Cela détermine donc, avec (16.3.11), et pour toute fonction φ la mesure lorsque θ est polynomiale. On conclut pour θ continue puisque la mesure est déterminée par son action sur le sous-espace des fonctions polynomiales. Cela achève la preuve. ■

16.11. Remarque. La preuve a mis en évidence qu'à h fixé on a :

$$\text{Tr} [\theta(h) \varphi] = \theta(\lambda_l) \text{Tr} [\Pi_D(h) \varphi \chi] + o(1) = \theta(\lambda_l) \sum_{j=1}^{m(\lambda_l)} \langle |\phi_j^h(x)|^2 dx, \varphi \rangle + o(1). \tag{16.3.16}$$

Avec la décomposition de quasi-orthogonale (13.4.25), on voit que si la densité d'états locale converge faiblement alors les coefficients p_{ij}^h aussi. On peut donc toujours supposer que les mesures $|\phi_j^h(x)|^2 dx$ convergent faiblement, ce qui n'enlève rien à la généralité de la situation.

Partie VI

Asymptotique hors-équilibre

Fonctions du moment asymptotique

Après avoir analysé les fonctions de l'énergie, on traite l'asymptotique des fonctions du moment. La situation est plus complexe, que dans le cas précédent, puisque celle-ci est anisotrope (cf. proposition 17.1). On donne une réponse complète à la question de l'asymptotique sous des hypothèses de répartition des puits sur l'île (puits alimentés ou non-alimentés, bien groupés ou isolés).

17.1 Remarque préliminaire

Rappelons que les fonctions du moment asymptotique entrant K_-^h ont été définies dans le chapitre 5 (p.60) comme des opérateurs à noyau dont le noyau (continu) est donné par

$$g(K_-^h)[x, y] \equiv \int_{k \in \mathbb{R}, \lambda(k) \neq 0} g(k) \psi_-(k, x) \overline{\psi_-(k, y)} \frac{dk}{2\pi h}, \quad g \in C_c^0(\mathbb{R}). \quad (17.1.1)$$

Dans le cas particulier où $g(k) = G(\lambda(k))$, c'est-à-dire celui d'une fonction de l'énergie (ou du Hamiltonien), $k \mapsto \lambda(k)$ étant la relation de dispersion, on a

$$g(K_-^h) = G(H(h)). \quad (17.1.2)$$

Rappelons que l'asymptotique des fonctions de l'énergie a été analysée dans le théorème 16.4 p.203. Dans le cas encore plus particulier où la fonction G est supportée dans les énergies positives, c'est-à-dire

$$G \in C_c(\mathbb{R}_+^*),$$

on peut récrire (17.1.1)

$$\begin{aligned} g(K_-^h)[x, y] &= \int_{k>0} G(k^2) \psi_-(k, x) \overline{\psi_-(k, y)} \frac{dk}{2\pi h} \\ &+ \int_{k<-\sqrt{B}} G(k^2 - B) \psi_-(k, x) \overline{\psi_-(k, y)} \frac{dk}{2\pi h} \\ &\equiv g_+(K_-^h)[x, y] + g_-(K_-^h)[x, y], \end{aligned} \quad (17.1.3)$$

où on a posé

$$g_+(k) = G(k^2) \cdot \mathbb{1}_{\{k>0\}}, \quad g_-(k) = G(k^2 - B) \cdot \mathbb{1}_{\{k<-\sqrt{B}\}}, \quad (17.1.4)$$

si bien que pour toute fonction $\varphi \in C_c(a; b)$ positive

$$\text{Tr}[G(H(h))\varphi] = \text{Tr}[g_+(K_-^h)\varphi] + \text{Tr}[g_-(K_-^h)\varphi], \quad (17.1.5)$$

les quantités écrites ayant un sens d'après le théorème de Mercer. On énonce donc

■ **17.1. Proposition.** *Toute fonction de l'énergie supportée dans les énergies positives est somme de deux fonctions du moment asymptotique supportées respectivement dans l'ensemble des moments positifs et négatifs.*

17.2 Hypothèses. Résultat immédiat

Dans le problème non-linéaire étudié, qui est en fait semi-linéaire, la densité de charges $dn[\rho^h]$ est définie comme une fonction du moment asymptotique. Ainsi, la densité $g(k)dk$ étant prescrite, on cherche de façon générale, à déterminer, pour un Hamiltonien du type puits dans une île avec potentiel inconnu, l'asymptotique de la fonctionnelle $\varphi \mapsto \text{Tr}[g(K_-^h)\varphi]$:

$$C_c^0(I) \xrightarrow{dn_g[K_-^h]} \mathbb{R}, \quad \varphi \mapsto \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{k \in \mathbb{R}, \lambda(k) \neq 0} |\psi_-(k, x)|^2 g(k) \frac{dk}{2\pi h} \varphi(x) dx. \quad (17.2.1)$$

Dans le problème non-linéaire en question, le potentiel inconnu V_{NL}^h s'obtient avec l'équation de Poisson. On se limitera au cas suivant, qui traduit dans les applications en vue le fait que le flux de particules dans la structure provient de $-\infty$.

■ **17.2. Hypothèse.** *On suppose que la fonction $g(k)$ est supportée dans les moments positifs et de plus que l'on peut la mettre sous la forme :*

$$g(k) = G(k^2) \cdot \mathbb{1}_{k>0}, \quad G \in C_c^0([\Lambda_*; \Lambda^*]).$$

17.3. Remarque. Avec l'écriture (17.1.5), en échangeant les rôles de a et b (ou en changeant le signe de k) l'étude de g_- est symétrique de celle de g_+ .

Puisque la fonction g est dominée par la fonction de l'énergie $G(\lambda(k))$, sur \mathbb{R} , on déduit directement :

■ **17.4. Proposition.** Soit g comme dans l'hypothèse 17.2. Alors la famille de mesures positives $\{dn_g[K_-^h]\}_{h>0}$ définie par (17.2.1) est bornée. Soit $d\mu_g$ une valeur d'adhérence. Alors, il existe des nombres $q_a, q_b \geq 0$, $t_i^\lambda \in [0; 1]$, $i = 1 \dots N$ et $\lambda \in \mathcal{E}_{rés}$ tels que pour toute fonction positive ou nulle $\varphi \in C^0(I)$

$$\int_a^b \varphi d\mu_g = \sum_{\lambda \in \mathcal{E}_{rés}} \sum_{i \in J(\lambda)} t_i^\lambda G(\lambda) \varphi(c_i) + q_a \varphi(a) + q_b \varphi(b).$$

On introduit la terminologie suivante :

■ **17.5. Définition.** On appelle solution classique toute valeur d'adhérence de la famille de mesures $\{dn_g[K_-^h]\}_{h>0}$ pour laquelle tous les coefficients t_i^λ valent 0 ou 1. On dira sinon que cette valeur d'adhérence est une solution quantique.

Preuve. On sait que la fonctionnelle $\varphi \mapsto \text{Tr}[g(K_-^h)\varphi]$ définit une mesure de Radon positive sur I , g étant fixée. Puisque l'on a $g(k) \leq G(\lambda(k))$, d'après l'expression des fonctions du moment asymptotique, on déduit que

$$\forall \varphi \geq 0, \quad 0 \leq \text{Tr}[g(K_-^h)\varphi] \leq \text{Tr}[G(H(h))\varphi]. \quad (17.2.2)$$

Il suffit enfin d'appliquer le théorème 16.4 p.203 avec $\theta \equiv G$, et de faire tendre h vers zéro : une mesure dominée par une mesure ponctuelle est en effet elle même une mesure ponctuelle. ■

■ **17.6. Corollaire.** Si le support de g ne contient pas d'énergie résonante, alors la mesure $\varphi \mapsto \text{Tr}[g(K_-^h)\varphi]$ en restriction à I converge faiblement vers 0.

Dans le cas du problème non-linéaire Schrödinger-Poisson, on obtient l'asymptotique suivante sur le potentiel inconnu V_{NL}^h :

■ **17.7. Corollaire.** Posons $c_0 := a, c_{N+1} = b$. À extraction près, et pour $\alpha \in]0; 1[$ fixé, le potentiel V_{NL}^h converge lorsque $h \rightarrow 0$ dans l'espace de Hölder $C^{0,\alpha}(I)$ vers un potentiel affine par morceaux sur I . En particulier, les points limites de la famille $(V_{NL}^h)_{h>0}$ sont dans le sous-espace $\mathcal{A} \subset BV_0^2(I)$ des fonctions affines sur $[c_i; c_{i+1}]$ ($i=0 \dots N$) :

$$V_{NL}^h \rightarrow V_{NL}^0 \in \mathcal{A}, \quad h \rightarrow 0,$$

où

$$\mathcal{A} := \{v \in BV_0^2(I), \quad \forall i = 0 \dots N, \quad v|_{[c_i; c_{i+1}]} \text{ est une fonction affine}\}.$$

17.8. Remarque.

1. Puisque $v \in \mathcal{A}$ est nulle en c_0 et en c_{N+1} par définition de BV_0^2 , v est codée par le vecteur \mathbf{v} de \mathbb{R}^N défini par $\mathbf{v} := (v(c_1), \dots, v(c_N))$, c'est même un isomorphisme linéaire entre \mathcal{A} et \mathbb{R}^n .
2. Ce résultat asymptotique sur le potentiel non-linéaire réduit considérablement la complexité du problème de calculer asymptotiquement le potentiel inconnu V_{NL}^h , puisque celui-ci vit à la limite dans un espace de dimension finie.
3. Ce résultat conforte l'intuition des physiciens, au moins dans le cas stationnaire, qui supposent que le comportement du système est codé par un nombre fini de paramètres, à savoir les résonances du système, cf. par exemple [PrSj].

Preuve. D'après le corollaire 10.19 p.114, la famille de mesures $(dn[\rho^h])_{h>0}$ est bornée, et donc la famille de potentiels $(V_{NL}^h)_{h>0}$ aussi dans $BV_0^2(I)$ d'après l'équation de Poisson. On conclut à l'aide de la proposition 2.9 de compacité (p. 28) pour établir la convergence du potentiel dans $C^{0,\alpha}(I)$, quitte à extraire. Le fait que la limite est affine par morceaux découle de la proposition précédente et en passant à la limite au sens des distributions dans l'équation de Poisson avec conditions de Dirichlet. ■

17.9. Remarque. Dans la suite, on s'attachera à déterminer ces coefficients t_i , les coefficients q_a et q_b n'influençant en rien l'asymptotique du potentiel V_{NL}^h d'après l'équation de Poisson.

Revenant alors à l'expression des fonction du moment (17.2.1), il suffit donc d'obtenir une bonne approximation et $L^2(\Omega)$ uniforme locale par rapport à k des fonctions propres généralisées $\psi_-(k, \cdot)$, Ω étant un voisinage fixe et petit des puits quantiques. On peut même se restreindre par rapport à k à un voisinage fixe des $\sqrt{\lambda}$, λ désignant une énergie résonante dans $[\Lambda_*; \Lambda^*]$, ce que l'on fait dans la suite.

■ **17.10. Hypothèse.** *On suppose en plus de l'hypothèse 17.2 que le support de la fonction g ne contient qu'une seule énergie résonante $\lambda \in \mathcal{E}_{rés}$.*

17.3 Calcul des fonctions du moment

Avec le résultat de convergence du potentiel dans le cas non-linéaire, on peut toujours se placer dans une situation linéaire où le potentiel inconnu converge dans un espace de Hölder.

■ **17.11. Hypothèse.** *On suppose que le potentiel \tilde{V}^h est uniformément borné dans $W^{1,\infty}(I)$ et converge dans un espace de Hölder $C^{0,\alpha}$, $\alpha \in]0; 1[$ vers une fonction \tilde{V}^0 .*

Le point de départ est le suivant : au vu de l'expression de la densité hors-équilibre 17.2.1, on souhaite obtenir une bonne approximation de la norme L^2 des fonctions propres généralisées $\{\psi_-(k, \cdot)\}$ du Hamiltonien $H(h)$ dans un voisinage fixe des puits résonants. Soit $\{\psi_-^{NR}(k, \cdot)\}$ les fonctions propres généralisées pour le hamiltonien $H^{NR}(h) = H(h) + W_R^h$. On a vu que la densité d'états locale pour ce Hamiltonien converge faiblement vers zéro (thm. 16.4p.203). Puisque les fonctions du moment sont dominées par les fonctions de l'énergie on a

■ **17.12. Proposition.** *La mesure $n_g[K_-^{NRh}](x)dx$ où*

$$n_g[K_-^{NRh}](x) := \int_{k \in \mathbb{R}, \lambda(k) \neq 0} g(k) |\psi_-^{NR}(k, x)|^2 \frac{dk}{2\pi h}$$

en restriction à $]a; b[$ converge faiblement vers zéro quand $h \rightarrow 0$.

■

On remarque ensuite que la fonction

$$u(k, \cdot) := \psi_-(k, \cdot) - \psi_-^{NR}(k, \cdot)$$

est pour tout $k > 0$ dans le domaine de $H(k^2; h)$, et que

$$(H(k^2; h) - k^2)u(k, x) = -W_R^h \psi_-^{NR}(k, x), \quad k > 0, x \in I, \quad (17.3.1)$$

si bien que

$$u(k, \cdot) = -(H(k^2; h) - k^2)^{-1} W_R^h \psi_-^{NR}(k, \cdot), \quad k > 0, \quad (17.3.2)$$

et on se ramènera à l'étude de $u(k, \cdot)$.

17.4 Puits résonants alimentés/non-alimentés

La discussion se fait à partir des quantités asymptotiques.

■ **17.13. Hypothèse.** On fixe une fois pour toutes une énergie asymptotiquement résonante $\lambda \in \mathcal{E}_{rés}$, et on rappelle que pour la métrique d'Agmon à l'énergie λ , on note S_0^λ la distance de la réunion des puits ponctuels résonants au bord de l'île, S_U le diamètre de la réunion des puits résonants et S_I le diamètre de l'île :

$$S_0^\lambda := d(\cup_{i \in J(\lambda)} \{c_i\}; \partial I), \quad S_U := \max_{j, k \in J(\lambda)} d(c_j; c_k), \quad S_I := d(a; b), \quad (17.4.1)$$

la distance d désignant la distance d'agmon pour le potentiel limite \tilde{V}^0 à l'énergie λ .

■ **17.14. Définition.** Soit $\lambda \in \mathcal{E}_{rés}$ une énergie résonante et c_i un puits résonant à l'énergie λ . On dira que le puits c_i est alimenté (resp. non-alimenté) par la gauche si $d(c_i; b) > d(c_i; a)$ (resp. $d(c_i; b) < d(c_i; a)$). On dira enfin que le puits est critique si $d(c_i; a) = d(c_i; b)$.

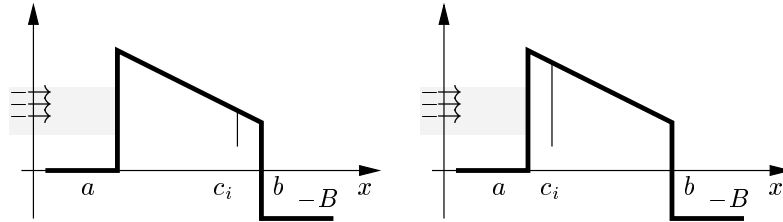


Figure 17.1. Le puits résonant c_i est non-alimenté sur la figure de gauche, et alimenté sur la figure de droite.

17.15. Remarque. Dans la suite, on dira plus brièvement alimenté ou non-alimenté. Cette définition privilégie l'un des bords de l'île, le choix de la terminologie étant motivée par le fait que la densité d'impulsion $g(k)$ est supportée dans \mathbb{R}_+^* . Si g est supportée dans \mathbb{R}_-^* , on parle de puits (non)-alimenté par la droite.

On se placera sous l'hypothèse plus forte suivante, et qui porte sur l'ensemble des puits résonants pour une énergie donnée :

■ **17.16. Hypothèse.** *On suppose qu'à l'énergie λ , les puits résonants à l'énergie λ sont tous alimentés ou tous non-alimentés. Autrement dit pour cette énergie :*

$$d(\cup_{i \in J(\lambda)} \{c_i\}; \partial I) = d(\cup_{i \in J(\lambda)} \{c_i\}; a), \quad \text{et} \quad 2(S_0^\lambda + S_U) < S_I,$$

ou

$$d(\cup_{i \in J(\lambda)} \{c_i\}; \partial I) = d(\cup_{i \in J(\lambda)} \{c_i\}; b), \quad \text{et} \quad 2(S_0^\lambda + S_U) < S_I,$$

17.4.1 Cas où les puits sont groupés

■ **17.17. Définition.** *Soit λ une énergie résonante. On dira que les puits résonants à l'énergie λ sont bien groupés si l'on a*

$$2(S_0^\lambda + S_U) + (m(\lambda) - 1)S_U < S_I,$$

où $m(\lambda)$ désigne la multiplicité asymptotique de l'énergie λ .

17.18. Remarque.

1. $S_U = 0$ si et seulement si $m(\lambda) = 1$.
2. Si la multiplicité de l'énergie résonante λ est simple, le puits résonant à l'énergie λ est donc connexe. Dans ce cas il est bien groupé.
3. Si $m(\lambda) > 1$ alors $S_U > 0$ et l'hypothèse de bien groupement est strictement plus forte que l'hypothèse 17.16.
4. La terminologie employée vient du fait que si les puits ne sont pas trop étendus sur l'île, c'est-à-dire $S_U > 0$ est suffisamment petit, alors l'hypothèse est vérifiée.

On a alors :

■ **17.19. Théorème.** *Soit λ une énergie résonante. On suppose que les puits résonants à l'énergie λ sont bien groupés. À extraction près, on a les résultats suivants quand $h \rightarrow 0$:*

- i) *Si les puits résonants sont non-alimentés, alors la mesure $dn_g[K_-^h]$, en restriction à $]a; b[$, converge faiblement vers 0. Autrement dit, les coefficients t_i de la proposition 17.4 sont tous nuls.*
- ii) *Si les puits résonants sont alimentés, alors la mesure $dn_g[K_-^h]$, en restriction à $]a; b[$, converge faiblement vers la mesure*

$$\varphi \mapsto \sum_{i \in J(\lambda)} G(\lambda) \varphi(c_i).$$

Autrement dit, les coefficients t_i de la proposition 17.4 sont dans ce cas égaux à 1.

17.20. Remarque. On peut faire l'interprétation suivante du résultat : lorsque tous les puits sont alimentés, l'effet tunnel des puits au point de sortie b est exponentiellement petit en comparaison de l'effet tunnel du point d'entrée a des particules aux puits. Asymptotiquement, la charge injectée reste donc piégée dans les puits, ce qui explique la valeur du coefficient t_i .

Preuve. Commençons par le lemme suivant :

■ **17.21. Lemme.** *Localement uniformément en $k > 0$, on a l'estimation ponctuelle suivante sur I*

$$\psi_-^{NR}(k, \cdot) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-d(a;x)/h}).$$

Preuve. On combine les résultats de décroissance des fonctions propres généralisées pour le problème complètement bouché avec les estimations de résolvante aux puits partiellement bouchés : la fonction

$$\varepsilon(k, x) := \psi_-^{NR}(k, \cdot) - \tilde{\psi}_-(k, \cdot)$$

est, pour tout $k > 0$, dans le domaine de $H^{NR}(k^2; h)$, et

$$\psi_-^{NR}(k, \cdot) = \tilde{\psi}_-(k, \cdot) - (H^{NR}(k^2; h) - k^2)^{-1} W_{NR}^h \tilde{\psi}_-(k, \cdot), \quad k > 0. \quad (17.4.2)$$

D'après la proposition 14.5 p.163 on a :

$$\tilde{\psi}_-(k, x) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{d}(a;x)/h}), \quad (17.4.3)$$

mais on peut remplacer dans l'estimation $\tilde{\mathcal{O}}$ la distance \tilde{d} par la distance d puisque les puits quantiques sont de diamètre euclidien égal à $2h$. Avec l'estimation de résolvante pour le problème des puits partiellement bouchés de la proposition 14.17 p.170, on obtient bien pour $x \in I$:

$$\psi_-^{NR}(k, x) = \tilde{\psi}_-(k, x) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(d(a;U_{NR}^h) + d(U_{NR}^h; x))/h}), \quad (17.4.4)$$

■

Pour en venir à la preuve du théorème : soit $\lambda = \lambda_l \in \mathcal{E}_{\text{rés}}$ une énergie résonante, soit $\varphi \in C_c(I)$ non-négative supportée autour des puits quantiques, et g une fonction de densité comme dans l'hypothèse 17.10. Quitte à supposer $h > 0$ assez petit, on peut supposer que

$$\forall \lambda(h) \in \sigma(H_D(h)) \cap \text{supp } g, \quad \lambda(h) \rightarrow \lambda_l, \quad \text{Card}\{\lambda(h)\} = m(\lambda_l). \quad (17.4.5)$$

Puisque la distance d'Agmon dépend continûment du paramètre h les inégalités limites sur les distances ont lieu aussi pour $h > 0$ assez petit en remplaçant $\tilde{\mathcal{V}}^0$ par $\tilde{\mathcal{V}}^h$. Plaçons-nous dans un premier temps dans le cas où les puits sont non-alimentés. Montrons alors que

$$\int_I \int_{k \in \mathbb{R}, \lambda(k) \neq 0} |\psi_-(k, x)|^2 g(k) \frac{dk}{2\pi h} \varphi(x) dx \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0. \quad (17.4.6)$$

On écrit pour cela :

$$\begin{aligned} |\psi_-(k, x)|^2 &= |\psi_-^{NR}(k, x) + \psi_-(k, \cdot) - \psi_-^{NR}(k, \cdot)|^2 \\ &= |\psi_-^{NR}(k, x) + u(k, \cdot)|^2 \\ &\leq 2|\psi_-^{NR}(k, x)|^2 + 2|u(k, \cdot)|^2 \end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned} 0 \leq \text{Tr}[g(K_-^h)\varphi] &\leq 2\text{Tr}[g(K_-^{NRh})\varphi] \\ &\quad + 2 \int_I \int_{k \in \mathbb{R}, \lambda(k) \neq 0} |u(k, x)|^2 g(k) \frac{dk}{2\pi h} \varphi(x) dx \\ &\leq 2\text{Tr}[g(K_{-NR}^h)\varphi] \\ &\quad + 2\|\varphi\|_{L^\infty}^2 \int_{k \in \mathbb{R}, \lambda(k) \neq 0} \|u(k, \cdot)\|_{L^2}^2 \frac{g(k)dk}{2\pi h}, \quad (17.4.7) \end{aligned}$$

la dernière majoration d'après Fubini, K_-^{NRh} désignant naturellement le moment asymptotique associé au Hamiltonien $H(h) + W_R^h$. Le premier terme de la somme ci-dessus tend vers zéro d'après la proposition 17.12. Quant au second terme, on se souvient de la définition (17.3.2) de $u(k, x)$ et on écrit en vertu de l'expression (16.2.1) p.204 de $[H(k^2; h) - k^2]^{-1}$

$$\begin{aligned} u(k, \cdot) &= -E(k^2; h)W_R^h\psi_-^{NR}(k, \cdot) \\ &\quad + E^+(k^2; h)E^{-+}(k^2; h)^{-1}E^-(k^2; h)W_R^h\psi_-^{NR}(k, \cdot), \quad (17.4.8) \end{aligned}$$

puis

$$\begin{aligned} \|u(k, \cdot)\|_{L^2}^2 &\leq 2\|E(k^2; h)W_R^h\psi_-^{NR}(k, \cdot)\|_{L^2}^2 \\ &\quad + 2\|E^+(k^2; h)E^{-+}(k^2; h)^{-1}E^-(k^2; h)W_R^h\psi_-^{NR}(k, \cdot)\|_{L^2}^2. \end{aligned} \quad (17.4.9)$$

Le premier terme se majore en utilisant que l'opérateur $E(k^2; h)$ est $\mathcal{O}(1)$ en norme tandis que $W_R^h\psi_-^{NR}(k, \cdot)$ est $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-d(a; U_R^h)/h})$ dans L^∞ . Par ailleurs sous l'hypothèse de non-alimentation des puits, on a

$$d(a; U_R^h) = S_I - (S_0^\lambda + S_U) + \mathcal{O}(h), \quad h \rightarrow 0. \quad (17.4.10)$$

Ainsi, on a uniformément par rapport à k :

$$\|E(k^2; w)W_R^h\psi_-^{NR}(k, \cdot)\|_{L^2}^2 \rightarrow 0, \quad h \rightarrow 0. \quad (17.4.11)$$

Quant au second terme, on utilise que les opérateurs $E^+(k^2; h)$ et $E^-(k^2; h)$ sont en norme d'opérateur uniformément bornés par rapport à k , tandis que la norme de $E^{-+}(k^2; h)^{-1}$ se majore à l'aide de la proposition 15.27. Cela donne, en posant

$$\Pi(k^2; h) := E^+(k^2; h)E^{-+}(k^2; h)^{-1}E^-(k^2; h) :$$

$$\|\Pi(k^2; h)W_R^h\psi_-^{NR}(k, \cdot)\|_{L^2}^2 = \tilde{O}\left(\frac{e^{2(m(\lambda_l)-1)S_U)/h}}{\min_{z \in \mathcal{Z}(h)} |k^2 - z|^2} e^{-2(S_I - (S_0^\lambda + S_U))/h}\right). \quad (17.4.12)$$

Posons alors pour toute résonance $z_i(h) \in \mathcal{Z}(h)$:

$$z_i(h) := E_i(h) - i\Gamma_i(h), \quad E_i(h), \Gamma_i(h) \in \mathbb{R}^*, \quad \lim_{h \rightarrow 0} E_i(h) = \lambda, \quad \lim_{h \rightarrow 0} \Gamma_i(h) = 0.$$

Le dénominateur de (17.4.12) est de la forme $(k^2 - E_i(h))^2 + \Gamma_i(h)^2$. En réinjectant (17.4.11) et (17.4.12) dans (17.4.7) il vient

$$\begin{aligned} 0 \leq \text{Tr}[g(K_-^h)\varphi] &\leq \tilde{O}\left(2\|\varphi\|_{L^\infty}^2 \int_{\text{supp } g} \frac{e^{-2(S_I - (S_0^\lambda + S_U))/h} e^{2(m(\lambda_l)-1)S_U)/h} g(k) dk}{(k^2 - E_i(h))^2 + \Gamma_i(h)^2} \frac{1}{2\pi h}\right) \\ &\quad + o(1)(\|\varphi\| + \|\varphi\|^2), \end{aligned} \quad (17.4.13)$$

l'indice i dépendant de k . Néanmoins, on peut toujours écrire quelque soit $i \in \{1 \dots m(\lambda_l)\}$ l'intégrande ci-dessus :

$$\frac{e^{-2(S_I - (S_0^\lambda + S_U))/h} e^{2(m(\lambda_l)-1)S_U)/h}}{(k^2 - E_i(h))^2 + \Gamma_i(h)^2} = \frac{e^{-2(S_I - (S_0^\lambda + S_U))/h} e^{2(m(\lambda_l)-1)S_U)/h}}{(k^2 - E_i(h))^2 + \Gamma_i(h)^2} \frac{\Gamma_i(h)}{\Gamma_i(h)}.$$

On utilise alors la minoration des parties imaginaires des résonances (prop.15.27), pour majorer $\Gamma_i(h)^{-1}$ dans la dernière équation par $C^{-1}e^{2(S_0^\lambda + S_U)/h}$, ce qui donne

$$\frac{e^{-2(S_I - (S_0^\lambda + S_U))/h} e^{2(m(\lambda_l)-1)S_U)/h}}{(k^2 - E_i(h))^2 + \Gamma_i(h)^2} \leq \frac{e^{-2\varepsilon/h}}{C} \frac{\Gamma_i(h)}{(k^2 - E_i(h))^2 + \Gamma_i(h)^2},$$

où $\varepsilon = S_I - 2(S_0^\lambda + S_U) - (m(\lambda_l) - 1)S_U > 0$ par hypothèse 17.16. On reconnaît dans la dernière majoration une densité de Cauchy centrée en $E_i(h)$ de paramètre $\Gamma_i(h)$, qui est bornée dans L^1 . Cela permet de majorer l'intégrale de (17.4.14) par :

$$\begin{aligned} 0 \leq \text{Tr}[g(K_-^h)\varphi] &\leq \tilde{O}\left(2\|\varphi\|_{L^\infty}^2 \int_{\text{supp } g} e^{-2\varepsilon/h} \frac{\Gamma_i(h)}{(k^2 - E_i(h))^2 + \Gamma_i(h)^2} \frac{g(k) dk}{2\pi h}\right) \\ &\quad + o(1)(\|\varphi\| + \|\varphi\|^2), \\ &= o(1), \end{aligned} \quad (17.4.14)$$

cela prouve le point $i)$ du théorème. Pour le point $ii)$, on a d'après (17.1.5)

$$\mathrm{Tr}[G(H(h))\varphi] = \mathrm{Tr}[g(K_-^h)\varphi] + \mathrm{Tr}[g_-(K_-^h)\varphi]. \quad (17.4.15)$$

On sait d'une part que $\mathrm{Tr}[G(H(h))\varphi]$ converge quand h tend vers zéro vers la quantité annoncée dans le théorème d'après le théorème 16.4 p.203. D'autre part, en changeant k en $-k$ (ou en échangeant les rôles de a et b) on peut considérer pour la densité $g_-(k)$ que les puits alimentés sont des puits non-alimentés : le cas $i)$ démontré entraîne que $\mathrm{Tr}[g_-(K_-^h)\varphi]$ tend vers 0. Cela démontre le résultat. ■

Dans le cas où le nombre de puits quantiques est égal à 1, on a donc, puisque l'hypothèse 17.17 est automatique le

■ **17.22. Corollaire.** *Si le nombre de puits quantiques est égal à 1, alors pour toute énergie résonante dans $[\Lambda_*; \Lambda^*]$, les limites possibles de la famille de mesure $\{dn_g[K_-^h]\}_{h>0}$ sont de la forme*

$$dn_g[K_-^0] = t\delta_{c_1}$$

avec $t = 0$ si $d(a; c_1) > d(c_1; b)$ et $t = 1$ si $d(a; c_1) < d(c_1; b)$.

La discussion sera complétée au dernier chapitre dans le cas critique d'égalité des distances d'Agmon, dans le cas particulier où λ est la plus petite énergie résonante pour le Hamiltonien (thm.18.36 p.254 et prop. 18.37 p.255).

17.4.2 Cas où les puits sont isolés

■ **17.23. Hypothèse.** *Soit $\lambda \in \mathcal{E}_{rés}$ une énergie résonante On pose*

$$\tilde{S}_U := \sup_{h>0} \max_{x \in [c_1; c_N]} |\mathcal{V}^h(x) - \lambda|^{1/2} (c_N - c_1), \quad S_0 := d(\cup_{i=1}^N \{c_i\}; \partial I),$$

et on suppose que

$$S_0 > \tilde{S}_U.$$

On dit alors que les puits quantiques sont strictement isolés pour l'énergie λ .

17.24. Remarque.

1. Noter que contrairement au cas des puits bien groupés, l'hypothèse d'isolation, qui fait intervenir l'énergie λ , porte sur l'ensemble des puits quantiques.
2. Si l'on introduit $S_U := \sup_{h>0} d(c_1, c_N; \mathcal{V}^0; \lambda)$, le diamètre d'Agmon de l'ensemble des puits, la condition $S_0 > S_U$ traduirait le fait que la région d'extension des puits résonants est confinée loin du bord de l'île.

3. Ainsi on travaille avec le maximum $|\mathcal{V}^h(x) - \lambda|^{1/2}$ plutôt qu'avec sa moyenne, ce qui est plus restrictif.

Les résultats du théorème 17.19 subsistent dans ce cas :

■ **17.25. Théorème.** *Supposons que l'hypothèse 17.23 est vérifiée. À extraction près, on a les résultats suivants :*

- i) *Si les puits résonants sont tous non-alimentés, alors la mesure $dn_g[K_-^h]$, en restriction à $]a; b[$, converge faiblement vers 0. Autrement dit, les coefficients t_i de la proposition 17.4 sont tous nuls.*
- ii) *Si les puits résonants sont alimentés, alors la mesure $dn_g[K_-^h]$, en restriction à $]a; b[$, converge faiblement vers la mesure*

$$\varphi \mapsto \sum_{i \in J(\lambda)} G(\lambda) \varphi(c_i).$$

Autrement dit, les coefficients t_i de la proposition 17.4 sont égaux à 1.

Preuve. Remarquons encore que les comparaisons de distances d'Agmon se traduisent par des conditions ouvertes dépendant continûment de $h > 0$. Si celles-ci sont satisfaites pour $\tilde{\mathcal{V}}^0$, elles le sont aussi pour $\tilde{\mathcal{V}}^h$, h assez petit. L'idée est d'améliorer l'estimation de la résolvante (prop. 15.30) en prouvant que l'on peut se ramener au cas $m(\lambda) = 1$ de simplicité des résonances, puis de reproduire les arguments de la preuve du théorème 17.19. La première étape se fait par une minoration du splitting des valeurs propres de $H_D(h)$:

■ **17.26. Proposition.** *Soit $\lambda_1(h) < \dots < \lambda_{m(\lambda)}(h)$ les $m(\lambda)$ valeurs propres de $H_D(h)$ convergeant vers λ , $h \rightarrow 0$. Alors il existe une constante $c > 0$ telle que pour tout $h > 0$ assez petit, on ait :*

$$\forall i = 1 \dots m(\lambda) - 1, \quad \lambda_{i+1}(h) - \lambda_i(h) \geq ce^{-\tilde{S}_U/h}.$$

En particulier, il existe $r > 0$ tel que chaque boule de centre $\lambda_i(h)$ et de rayon $re^{-\tilde{S}_U/h}$ contienne exactement une seule résonance.

Preuve. On interprète pour cela $H_D(h)$ comme une perturbation d'un problème auto-adjoint pour lequel le splitting entre les valeurs propres se calcule assez précisément. Soit $\hat{H}(h)$ le Hamiltonien de domaine $H^2(\mathbb{R})$ opérant par

$$\forall u \in H^2(\mathbb{R}), \quad \hat{H}(h)u = -h^2 u'' + \hat{\mathcal{V}}^h u,$$

$$\hat{\mathcal{V}}^h \equiv \mathbb{1}_I \cdot \mathcal{V}^h + \mathbb{1}_{]-\infty; a]} \cdot \mathcal{V}^h(a) + \mathbb{1}_{[b; \infty[} \cdot \mathcal{V}^h(b).$$

Le potentiel $\hat{\mathcal{V}}^h$ coïncide avec \mathcal{V}^h sur l'île et est raccordé de façon C^0 en dehors de cet intervalle à des fonctions constantes (figure 17.2).

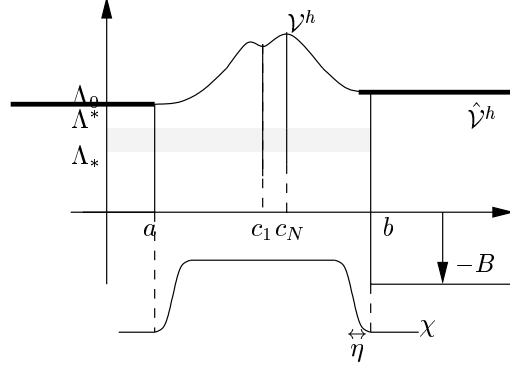


Figure 17.2. Potentiel étendu à \mathbb{R} , et fonction χ , η étant arbitrairement petit.

Introduisons également la fonction plateau régulière χ déjà rencontrée (figure 17.2, $\eta > 0$ étant arbitrairement petit). Par hypothèse 1.2, on a $\hat{\mathcal{V}}^h \geq \Lambda_0$, pour tout $h > 0$, on a par construction

$$\inf \sigma_{\text{ess}}(\hat{H}(h)) \geq \Lambda_0 > \Lambda_*,$$

et d'après le corollaire 10.13 p.108 sur le spectre du problème de Dirichlet, on sait que le nombre de valeurs propres de $\hat{H}(h)$ sur un petit intervalle Λ indépendant de h autour de λ est uniformément borné pour $h > 0$ assez petit.

D'après le théorème 2 de [KiSi] appliqué avec $[a; b] = [c_1 - h; c_N + h]$, et $\alpha^2 = \Lambda_0$, on dispose d'une minoration du splitting entre les valeurs propres de $\hat{H}(h)$ dans un voisinage disons de taille $o(1)$ de λ :

$$\exists C > 0, \quad |\hat{\lambda}(h) - \hat{\lambda}'(h)| \geq C e^{-\tilde{S}_U/h}, \quad (17.4.16)$$

$\hat{\lambda}(h)$, et $\hat{\lambda}'(h)$ désignant deux valeurs propres distinctes de $\hat{H}(h)$ dans cet intervalle. Si maintenant $\lambda(h)$ désigne une valeur propre de $H_D(h)$ convergeant vers λ , et $\phi(h)$ un vecteur propre normalisé dans L^2 associé, on a

$$\hat{H}(h)\chi\phi(h) = \lambda(h) \cdot \chi\phi(h) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0/h}).$$

Comme on dispose pour $h > 0$ assez petit de $m(\lambda)$ vecteurs quasi-orthonormés satisfaisant cette dernière estimation, le théorème de comparaison 9.7 p.97 donne (utiliser un principe des tiroirs comme dans

la preuve du théorème 12.9 p.133) que $\hat{H}(h)$ possède au moins $m(\lambda)$ valeurs propres convergeant vers λ quand $h \rightarrow 0$.

Inversement, si $\hat{\lambda}(h)$ est une de ces valeurs propres avec un vecteur unitaire $\hat{\phi}(h)$ associé, on a

$$H_D(h)\chi\hat{\phi}(h) = \hat{\lambda}(h) \cdot \chi\hat{\phi}(h) + \tilde{O}(e^{-S_0/h}).$$

Appliquons alors le théorème de comparaison à $H_D(h)$ dans chaque boule de centre $\hat{\lambda}(h)$, et de rayon $r := Ce^{-\tilde{S}_U/h}/3$, la constante C étant celle de (17.4.16). Ces boules sont deux à deux disjointes et encore avec un principe des tiroirs, et la finitude du nombre de valeurs propres de $H(h)$, on dispose d'un $a(h) = \alpha e^{-\tilde{S}_U/h}$, $\alpha > 0$, pour appliquer le théorème de comparaison dans chaque boule. Cela donne

$$\vec{d}(\mathbb{C} \cdot \chi\hat{\phi}(h); \Phi) \leq \frac{1}{(1 + o(1))\alpha e^{-\tilde{S}_U/h}} \tilde{O}(e^{-S_0/h})$$

et par hypothèse 17.23 dit en particulier par cardinalité que dans chacune de ces $m(\lambda)$ boules, $H_D(h)$ possède exactement une valeur propre. Cela montre la première partie de la proposition. Le second point découle du corollaire 15.18 p.191 de localisation des résonances puisque $\tilde{S}_U < S_0 < 2S_0^\lambda$. ■

Pour en venir à la preuve du théorème : on se place dans la situation *i*) de l'énoncé. D'après la proposition précédente, on peut effectuer une subdivision du support de g telle que sur chaque sous-intervalle, la matrice $E^{-+}(\lambda)$ est un scalaire.



Figure 17.3. Sous l'hypothèse de Kirsch Simon, il y a une bijection naturelle entre les λ et les z .

Dans ce cas la norme de $E^{-+}(\lambda)^{-1}$ vérifie

$$\|E^{-+}(\lambda)^{-1}\| = \tilde{O} \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{|\lambda - z_i(h)|} \right), \quad (17.4.17)$$

et par suite

$$\|E^{-+}(k^2)^{-1}\|^2 = \tilde{O} \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{(k^2 - E_i(h))^2 + \Gamma_i(h)^2} \right), \quad (17.4.18)$$

toujours avec l'écriture $z_i(h) = E_i(h) - i\Gamma_i(h)$. Il suit que la majoration (17.4.12) devient ici

$$\|\Pi(k^2; h) W_R^h \psi_-^{NR}(k, \cdot)\|_{L^2}^2 = \tilde{\mathcal{O}} \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{|k^2 - z_i(h)|^2} e^{-2(S_I - (S_0 + S_U))/h} \right), \quad (17.4.19)$$

qui se réécrit à l'aide d'une "astuce" déjà rencontrée

$$\|\Pi(k^2; h) W_R^h \psi_-^{NR}(k, \cdot)\|_{L^2}^2 = \sum_{i=1}^n \tilde{\mathcal{O}} \left(\frac{\Gamma_i(h)}{|k^2 - z_i(h)|^2} \frac{e^{-2(S_I - (S_0 + S_U))/h}}{\Gamma_i(h)} \right). \quad (17.4.20)$$

Dans chaque terme de la somme, le premier facteur est borné dans L^1 , tandis que le second se majore par $e^{-2(S_I - 2(S_0 + S_U))/h} \rightarrow 0$, on obtient bien que l'intégrale en k du membre de droite de (17.4.20) tend vers 0, ce qui donne i) et termine la preuve. ■

17.27. Remarque.

1. Notons que l'estimation du splitting de [KiSi] repose sur des propriétés globales du potentiel, ce qui explique pourquoi l'hypothèse 17.23 porte aussi sur la position des puits non résonants.
2. Il est artificiel dans l'hypothèse 17.23 de comparer des grandeurs sur le potentiel limite mettant en jeu d'une part son maximum \tilde{S}_U , et sa moyenne (*i.e.* la distance d'Agmon). Toutefois, il est probable que l'on puisse (cf. fin de la preuve du thm. 2 de l'article [KiSi]) remplacer dans les variables modifiées de Prüfer le paramètre λ par $\lambda' := \int_a^b |V - E|^{1/2}$ et d'appliquer le lemme de Grönwall pour faire apparaître dans la minoration du splitting la distance d'Agmon, ce qui est plus satisfaisant.
3. Toutefois, cette hypothèse affaiblie ne donne pas de renseignement nouveau sur l'asymptotique de la mesure hors-équilibre, puisque la configuration des puits est qualitativement la même. Il est plus intéressant d'analyser les cas critiques, cf. chap. suivant, qui mettront en évidence l'existence de solutions quantiques.

Solutions quantiques

L'objectif de ce dernier chapitre est d'étudier des cas particuliers présentant une asymptotique non-classique au sens de la définition 17.5 p.217. Autrement dit, on met en évidence des cas où les coefficients t_i^λ de la proposition 17.4 p.217 sont dans l'intervalle $]0; 1[$. On continuera de travailler pour cela sous l'hypothèse que les puits quantiques sont strictement isolés, ce qui permet de traiter les résonances une par une, tout en conservant néanmoins la complexité géométrique du problème (délocalisation des fonctions propres du problème de Dirichlet dans les puits quantiques). On commence pour cela par établir un résultat utile en soi : la formule de Breit-Wigner, puis la règle d'or de Fermi. Cela donne ensuite une expression plus transparente des coefficients t_i^λ de la proposition 17.4 p.217 en lien direct avec la configuration des puits sur l'île. Les cas particuliers de solutions quantiques sont mis en évidence dans les situations élémentaires du point de vue de la complexité : $N = 1$ ou $N = 2$. En particulier on complète le résultat du corollaire 17.22 p.225.

Dans ce chapitre, on fixera une fois pour toutes une énergie résonante $\lambda \in [\Lambda_; \Lambda^*]$ pour le Hamiltonien $H(h)$. Sauf mention contraire, d désignera la distance d'Agmon pour le potentiel \mathcal{V}^h à l'énergie λ .*

18.1 Hypothèse de simplicité

Pour plus de simplicité, on oubliera l'aspect non-linéaire du problème. On se place dans un contexte où la famille de fonctions $\{\tilde{\mathcal{V}}^h\}_{h>0}$ est donnée et vérifie certaines propriétés régularité et de convergence.

■ **18.1. Hypothèse.** On suppose que le potentiel total $\tilde{\mathcal{V}}^h$ est uniformément borné dans $W^{1,\infty}(I)$ et converge dans l'espace de Hölder $C^{0,\alpha}(I)$ pour un $\alpha \in]0; 1[$, vers un potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^0$. Soit d_0 la distance d'Agmon pour le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^0$, à l'énergie λ . On suppose l'on a

$$\sup_{h>0} \max_{x \in [c_1; c_N]} |\mathcal{V}^h - \lambda|^{1/2} (c_N - c_1) =: \tilde{S}_U < S_0 := d_0(\cup_{i=1}^N \{c_i\}; \partial I),$$

c'est-à-dire que les puits résonants sont strictement isolés.

En particulier, on a $S_U := d_0(c_1, c_N) \leq \tilde{S}_U < S_0$. D'après la définition de la distance d'Agmon et du profil des puits quantiques $w_i(x/h)$, si $h > 0$ est assez petit, on a aussi

$$\max_{x \in [c_1; c_N]} |\mathcal{V}^h - \lambda|^{1/2} (c_N - c_1) =: \tilde{S}_U^h < S_0^h := d(U^h; \partial I), \quad (18.1.1)$$

puisque

$$\tilde{S}_U^h = \tilde{S}_U + o(1), \quad S_0^h = S_0 + o(1), \quad h \rightarrow 0. \quad (18.1.2)$$

Soit $n := m(\lambda)$ le nombre de valeurs propres pour le problème de Dirichlet convergent vers λ (n ne dépend pas de h pour h assez petit, thm. 13.19 p.146). D'après la proposition 17.26, si on note ces valeurs propres (qui sont bien sûr simples) $\lambda_1^h < \dots < \lambda_n^h$:

$$\exists C > 0, \quad p \neq q \Rightarrow |\lambda_p^h - \lambda_q^h| \geq C e^{-\tilde{S}_U^h/h} =: r^h. \quad (18.1.3)$$

Par ailleurs, le corollaire 15.18 p.191 de localisation des résonances donne que pour tout $S \in]S_0^h - \eta; S_0^h]$, pour $j = 1 \dots n$, il y a dans les ensembles disjoints

$$B_{j,S}^h := \{z \in \mathbb{C} \mid |z - \lambda_j^h| < e^{-2S/h} =: \rho_S^h\},$$

une et une seule résonance z_j^h , puisque $r^h \gg \rho_S^h$ pour η assez petit.

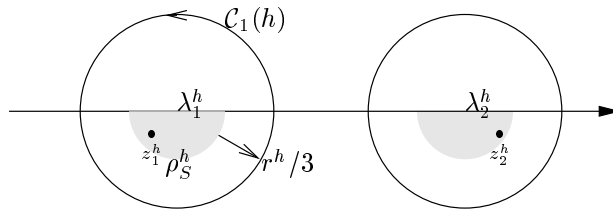


Figure 18.1. Séparation des valeurs propres et des résonances.
 $\rho_S^h / e^{\tilde{S}_U^h/h} \rightarrow 0$ exponentiellement vite quand $h \rightarrow 0$.

18.2. Remarque. La régularité supposée de $\tilde{\mathcal{V}}^h$ dans l'hypothèse 18.1 sera renforcée dans certains cas particuliers.

18.2 Formule de Breit-Wigner

L'hypothèse 18.1 de simplicité, qui permet de traiter les résonances séparément sans exclure le cas où les fonctions propres du problème de Dirichlet sont délocalisées dans les puits, conduit à l'analogie de la formule semi-classique de Breit-Wigner établie dans un cadre purement semi-classique dans [GeMa].

■ **18.3. Hypothèse.** *On suppose que les N puits sont résonants à l'énergie λ et on renforce l'hypothèse 18.1 en supposant que*

$$\tilde{S}_U < S_0/2.$$

18.4. Remarque. En particulier on a $U_R^h = U^h$, et $H_{NR}(\zeta; h) = \tilde{H}(\zeta; h)$. La première partie de l'hypothèse est une commodité d'écriture car tous les résultats de cette section et de la suivante seraient vrais sans supposer que les N puits sont résonants à l'énergie λ . Il faudrait remplacer alors $\tilde{H}(h)$ par $H^{NR}(h)$. La seconde partie de l'hypothèse garantit que pour $h > 0$ assez petit, on a aussi $\tilde{S}_U^h < S_0^h/2$.

■ **18.5. Théorème.** *On se place sous l'hypothèse 18.3. Pour $j = 1 \dots n$, soit ϕ_j^h un vecteur propre unitaire pour la valeur propre λ_j^h de $H_D(h)$. Le noyau de la densité spectrale pour $H(h)$ est donnée pour $\lambda \in]\lambda_1^h - r^h; \lambda_n^h + r^h[$, et pour $x \in I$ par*

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial \lambda}(x, y; \lambda; h) &= \frac{\partial \tilde{e}}{\partial \lambda}(x, y; \lambda; h) - \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{j=1}^n \frac{1}{\lambda - z_j^h} \phi_j^h(x) \phi_j^h(y) \\ &\quad + K(x, y; \lambda; h), \end{aligned}$$

où $\partial \tilde{e} / \partial \lambda$ désigne le noyau de la densité spectrale du Hamiltonien aux puits bouchés $\tilde{H}(h)$, et où le noyau résiduel K satisfait l'estimation uniforme

$$K(x, y; \lambda; h) = \tilde{O} \left(e^{2\tilde{S}_U^h/h} e^{-S_0 - \min(\gamma(x, y); \gamma(y, x))/h} \right)$$

la fonction γ étant définie par

$$\gamma(x; y) = d(x, \partial I) + d(\{c_1 \dots c_N\}; y).$$

18.6. Remarque.

1. On sait en effet que la résolution spectrale de $H(h)$ dans la région spectrale étudiée et en restriction à l'île est un opérateur intégral, à noyau continu.

2. La distance intervenant dans le terme résiduel est la longueur du chemin le plus court joignant x et y en passant par les puits et le bord de l'île, corrigé par un facteur $e^{2\tilde{S}_U^h/h}$.
3. Cette formule peut également s'interpréter comme une formule perturbative, au sens où l'introduction de puits quantiques au potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h$ induit dans la densité spectrale une perturbation de rang fini portée par le sous-espace des états de Dirichlet, et donc localisée en énergie et en espace.

Preuve. Elle consiste à écrire un problème de Grushin dans une décomposition de l'espace L^2 adaptée aux éléments propres de $H(z; h)$, puis d'utiliser des estimations d'Agmon. On établit au préalable le résultat utile suivant :

■ **18.7. Lemme.** Fixons $\zeta_0 \in \Omega(\varepsilon_*; h)$, et plaçons-nous sous l'hypothèse 18.3. Pour $j = 1 \dots n$, notons $\mathcal{C}_j(h)$ le cercle de centre λ_j^h et de rayon $r^h/3 = e^{-\tilde{S}_U^h/h}/3$. Soit alors $\Psi_j^h(\zeta_0)$ l'élément de $D(H(\zeta_0; h))$ défini par :

$$\Psi_j^h(\zeta_0) := \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathcal{C}_j(h)} (H(\zeta_0; h) - z)^{-1} \chi \phi_j^h dz,$$

la fonction plateau χ étant celle définie fig. 17.2 p.227. Alors $\Psi_j^h(\zeta_0) \in D(H(\zeta_0; h))$, et

$$H(\zeta_0; h) \Psi_j^h(\zeta_0) = z(\zeta_0) \Psi_j^h(\zeta_0),$$

$z(\zeta)$ étant l'unique nombre complexe voisin de λ_j^h pour lequel l'opérateur $H(\zeta; h) - z(\zeta)$ n'est pas injectif (théorème 15.16 p. 190). De plus, on a l'estimation ponctuelle uniforme en $x \in I$ et $\zeta_0 \in \Omega(\varepsilon_*; h)$ suivante :

$$\forall x \in I, \quad |\Psi_j^h(\zeta_0)(x) - \chi \phi_j^h(x)| \lesssim_\eta e^{-(d(x; \partial I) + S_0^h - 2\tilde{S}_U^h)/h}.$$

18.8. Remarque.

1. Noter que pour $h > 0$ assez petit, en vertu de l'hypothèse 18.3, on a $2\tilde{S}_U^h - S_0^h < 0$. Par suite l'approximation est exponentiellement bonne sur toute l'île, et le vecteur $|\Psi_j^h(\zeta_0)$ n'est pas nul.
2. Dans le cas particulier où $N = 1$, la multiplicité des énergies asymptotiquement résonante est simple, et la formule est valable avec $\tilde{S}_U = 0$.

Preuve. La première assertion découle de la définition du projecteur spectral. Pour le reste, on utilise la formule (15.4.10) p.193 déjà vue :

$$\chi \phi_j^h - \Psi_j^h(\zeta_0) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathcal{C}_j(h)} (z(\zeta_0) - \zeta)^{-1} (\zeta - H(\zeta_0; h))^{-1} [P(h), \chi] \phi_j^h d\zeta, \quad (18.2.1)$$

où $z(\zeta_0)$ est l'unique z dans $B_{j,S}^h$ pour lequel $H(\zeta_0; h) - z(\zeta_0)$ n'est pas injectif (théorème 15.16 p.190). Par ailleurs, pour les ζ sur $\mathcal{C}_j(h)$, la méthode de construction d'un inverse approché fournit l'estimation uniforme en ζ du noyau de $(H(\zeta_0; h) - \zeta)^{-1}$ semblable à celle de la proposition 14.17p.170, et uniforme en ζ_0 :

$$\forall \zeta \in \mathcal{C}_j(h), \quad \|\tilde{\chi}_{x_0}(H(\zeta_0; h) - \zeta)^{-1}\tilde{\chi}_{y_0}\| \lesssim_\eta \frac{e^{-d(x_0, y_0)/h}}{|\zeta - \lambda_j^h|}. \quad (18.2.2)$$

On obtient finalement l'approximation de la proposition, puisque l'on a $|\zeta - \lambda_j^h| \geq Ce^{-\tilde{S}_V^h/h}/3$, et en utilisant la décroissance des fonctions propres ϕ_j^h . ■

À présent, considérons la version non auto-adjointe du problème de Dirichlet introduit dans la section 2 du chapitre 15. L'hypothèse de simplicité permet du point de vue algébrique, et pour $\zeta \in \Omega(\varepsilon_*; h)$, de traiter les résonances une par une. Cela conduit à poser, pour $z \in \Omega(\varepsilon_*; h)$, l'indice j étant fixé :

$$\begin{cases} (H(\zeta; h) - z)u + u^- \Psi_j^h(\zeta) = v \\ \langle \overline{\Psi_j^h(\zeta)}, u \rangle_{L^2} = v^+, \end{cases} \quad (18.2.3)$$

où $u \in D(H(\zeta; h))$, $v \in L^2(I)$, $u^-, v_+ \in \mathbb{C}$, et $\Psi_j^h(\zeta)$ est donné par le lemme précédnt. Rappelons aussi que le vecteur $\bar{\Psi}_j^h(\zeta)$ est vecteur propre pour l'adjoint de $H(\zeta; h) - z(\zeta)$ (qui n'est autre que $H'(\bar{\zeta}; h) - \bar{z}(\zeta)$ d'après la proposition 7.9 p.76). D'après le lemme 18.7 on dispose pour $h > 0$ assez petit de la décomposition de $L^2(I)$ adaptée à ce problème, à savoir :

$$L^2(I) = \text{Vect} \{ \bar{\Psi}_j^h(\zeta) \} \oplus \text{Vect} \{ \Psi_j^h(\zeta) \}^\perp \equiv E'' \oplus E'. \quad (18.2.4)$$

Renormalisons $\Psi_j^h(\zeta)$ par la condition

$$\|\Psi_j^h(\zeta)\|_{L^2} = 1, \quad (18.2.5)$$

et remplaçons l'état anti-résonant $\bar{\Psi}_j^h(\zeta)$ par

$$\hat{\Psi}_j^h(\zeta) := \frac{\overline{\Psi_j^h(\zeta)}}{\langle \overline{\Psi_j^h(\zeta)}, \Psi_j^h(\zeta) \rangle}, \quad (18.2.6)$$

de sorte que

$$\langle \Psi_j^h(\zeta), \hat{\Psi}_j^h(\zeta) \rangle = 1. \quad (18.2.7)$$

En inversant le système suivant cette décomposition, on obtient la solution (v, v^+)

$$\begin{cases} E(\zeta; z)v := (H(\zeta; h) - z)|_{E'}^{-1}v' \\ E^+(\zeta; z)v^+ := v^+ \Psi_j^h(\zeta) = E^+(\zeta)v^+ \\ E^-(\zeta; z)v := \langle \hat{\Psi}_j^h(\zeta), v \rangle = E^-(\zeta)v \\ E^{-+}(\zeta; z)v^+ := (z(\zeta) - z)v^+. \end{cases} \quad (18.2.8)$$

Cela donne alors pour la résolvante dans le formalisme de Grushin :

$$(H(\zeta; h) - z)^{-1} = E(\zeta; z) + \frac{1}{z(\zeta) - z} E^+(\zeta) E^-(\zeta), \quad (18.2.9)$$

qui devient, en composant à droite par $(H(\zeta; h) - z)(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} = Id - W^h(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}$

$$\begin{aligned} (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} &= (H(\zeta; h) - z)^{-1} - E(\zeta; z) W^h(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} \\ &\quad - \frac{1}{z(\zeta) - z} E^+(\zeta) E^-(\zeta) W^h(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}. \end{aligned}$$

on récrit dans le dernier terme W^h sous la forme $W^h = [\tilde{H}(\zeta; h) - z] - [H(\zeta; h) - z]$, et utilisant la relation

$$E^-(\zeta)[H(\zeta; h) - z] = (z(\zeta) - z)E^-(\zeta)$$

qui traduit que $\hat{\Psi}_j^h(\zeta)$ est vecteur propre de $[H(\zeta; h) - z]^*$, on aboutit à l'expression finale :

$$\begin{aligned} (H(\zeta; h) - z)^{-1} &= (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} - \frac{1}{z - z(\zeta)} E^+(\zeta) E^-(\zeta) \\ &\quad + E(\zeta) W^h(\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1} \\ &\quad - E^+(\zeta) E^-(\zeta) (\tilde{H}(\zeta; h) - z)^{-1}. \end{aligned}$$

On a aussi une expression similaire pour le problème adjoint. Reliant ensuite les variables ζ et z par $\zeta = z$, et $z = \lambda \in \mathbb{R}$, et appliquant la formule de Stone, on obtient la nouvelle expression de la densité spectrale dans l'île pour $H(h)$ (cf. théorème 16.1 p.202) identique à celle de [GeMa], c'est-à-dire :

$$\mathbb{1}_I \frac{\partial e}{\partial \lambda}(x, y; \lambda) \mathbb{1}_I = \mathbb{1}_I \frac{\partial \tilde{e}}{\partial \lambda}(x, y; \lambda) \mathbb{1}_I - \frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\frac{1}{\lambda - z_j^h} \Psi_j^h(x) \hat{\Psi}_j^h(y) \right) + N(x, y; \lambda). \quad (18.2.10)$$

Ici, $N(x, y; \lambda)$ désigne le noyau de l'opérateur

$$\begin{aligned} &E(\lambda) W^h[(\tilde{H}(\lambda; h) - \lambda)^{-1} - (\tilde{H}(\lambda; h) - \lambda)^{-1*}] \\ &+ (E(\lambda) - E^*(\lambda)) W^h(\tilde{H}(\lambda; h) - \lambda)^{-1*} \\ &+ E^{+*} E^{-*} (\tilde{H}(\lambda; h) - \lambda)^{-1} \\ &- E^+ E^- (\tilde{H}(\lambda; h) - \lambda)^{-1}. \end{aligned}$$

Si $(\tilde{E}_\lambda)_\lambda$ désigne la résolution spectrale du Hamiltonien $\tilde{H}(h)$, alors on peut récrire N comme le noyau de

$$\begin{aligned} E(\lambda) W^h \frac{\partial \tilde{E}}{\partial \lambda} &+ (E(\lambda) - E^*(\lambda)) W^h (\tilde{H}(\lambda; h) - \lambda)^{-1*} \\ &+ [E^{+*} E^{-*} (\tilde{H}(\lambda; h) - \lambda)^{-1*} - E^+ E^- (\tilde{H}(\lambda; h) - \lambda)^{-1}]. \end{aligned}$$

Il reste à estimer les termes du noyau résiduel. Cela consiste essentiellement en une amélioration des estimations d'Agmon dues à la présence de termes de la forme $A - A^*$ avec A faiblement non auto-adjoint.

Ainsi on a

■ **18.9. Lemme.** *Uniformément en $\lambda \in [\lambda_j(h) - r^h/2; \lambda_j(h) + r^h/2]$, et uniformément localement en $(x, y) \in]a; b[\times]a; b[$, le noyau de l'opérateur $\frac{\partial \tilde{E}}{\partial \lambda}$ est $\tilde{O}(e^{-(d(x, \partial I) + d(y, \partial I))/h})$.*

18.10. Remarque. Cette estimation est bien meilleure que l'estimation *a priori* dont on dispose avec la proposition 14.3 p.162.

Preuve. On introduit le Hamiltonien $\hat{H}(h)$ de domaine $H^2(\mathbb{R})$ pour lequel le potentiel coïncide avec celui de $\tilde{H}(h)$ sur I , et étendu à la droite réelle par des constantes de sorte que le potentiel ainsi obtenu \hat{V}^h est continu (construction analogue à celle indiquée sur la figure 17.2 p.227). Soit alors un point y_0 dans I et appelons \tilde{u} et \hat{u} les solutions respectives des problèmes $(\tilde{H}(z; h) - z)u = \chi_{y_0}$ et $(\hat{H}(h) - z)u = \chi_{y_0}$, z étant un complexe de partie imaginaire strictement positive, de partie réelle dans $[\lambda_j^h - r^h/3; \lambda_j^h + r^h/3]$. Par des estimations de résolvantes déjà vues on sait que \hat{u} est $\tilde{O}(e^{-(d(y_0, x))})$. Soit alors $v := \tilde{u} - \mathbb{1}_I \hat{u}$. Alors v est solution du problème elliptique $\tilde{P}(h)u = 0$ avec conditions aux limites sur I données par \hat{u} . Encore par une égalité d'énergie, il suit que l'on a

$$\forall x \in I, \quad (\tilde{u} - \mathbb{1}_I \hat{u})(x) = \tilde{O}(e^{-d(y_0, \partial I)/h} e^{-d(\partial I, x)/h}). \quad (18.2.11)$$

On peut reproduire ce raisonnement pour l'adjoint de $(\tilde{H}(z; h) - z)$. On obtient une fonction v^* satisfaisant l'estimation ponctuelle uniforme sur I (18.2.11). Faisant tendre la partie imaginaire de z vers 0, on aboutit avec des notations évidentes à :

$$\frac{\partial \tilde{E}}{\partial \lambda}(x, y_0; \lambda, h) - \mathbb{1}_I \frac{\partial \hat{E}}{\partial \lambda}(x, y_0; \lambda, h) = \tilde{O}(e^{-d(y_0, \partial I)/h} e^{-d(\partial I, x)/h}), \quad (18.2.12)$$

et puisque λ n'est certainement pas une valeur spectrale de $\hat{H}(h)$, le second terme du membre de gauche de (18.2.12) est nul, ce qui prouve le lemme. ■

■ **18.11. Corollaire.** *Pour $\lambda \in [\lambda_j(h) - r^h/2; \lambda_j(h) + r^h/2]$, le noyau de $E(\lambda)W^h \frac{\partial \tilde{E}}{\partial \lambda}$ est $\tilde{O}(e^{-(S_0^h - 2\tilde{S}_U^h + d(x, U^h) + d(y, \partial I))/h})$, localement uniformément en (x, y) dans $]a; b[\times]a; b[$.*

Preuve. En effet, il suffit de considérer la représentation intégrale suivante de l'opérateur $E(\lambda)$, obtenue à partir de la formule

$$(H(\lambda; h) - z)^{-1} = E(\lambda, z) - \frac{1}{z - z(\lambda)} E^+(\lambda) E^-(\lambda),$$

à savoir

$$E(\lambda) = \frac{1}{2i\pi} \int_{C_\lambda} (H(\lambda; h) - z)^{-1} \frac{dz}{z - \lambda},$$

où C_λ désigne un contour contenu dans $\Omega(\varepsilon_*; h)$ entourant λ et situé au moins à distance $\theta e^{-\tilde{S}_V^h/h}$ des $\lambda_j(h)$, avec $\theta \in]0; 1]$ ce qui est toujours possible avec l'hypothèse 18.3. On utilise ensuite le résultat de décroissance (18.2.2) du noyau de $(H(\lambda; h) - z)^{-1}$, valable également pour $z \in C_\lambda$. Cela donne que le noyau de $E(\lambda)$ est $\tilde{O}(e^{-(d(x,y)-2\tilde{S}_V^h)/h})$. On conclut avec le lemme précédent. ■

■ **18.12. Lemme.** *Le noyau de $E(\lambda) - E^*(\lambda)$ est également*

$$\tilde{O}(e^{-(S_0^h - 2\tilde{S}_V^h + d(x, U^h) + d(y, \partial I)/h)}),$$

uniformément en $\lambda \in [\lambda_j(h) - r^h/2; \lambda_j + r(h)/2]$, localement uniformément en (x, y) dans $]a; b[\times]a; b[$.

Preuve. En effet, pour λ fixé et avec le contour C_λ introduit dans le corollaire précédent, on a

$$E(\lambda) - E^*(\lambda) = \frac{1}{2i\pi} \int_{C_\lambda} (H(\lambda; h) - \zeta)^{-1} - (H^*(\lambda; h) - \zeta)^{-1} \frac{d\zeta}{\zeta - \lambda},$$

avec le lemme 18.9, on a

$$\begin{aligned} E(\lambda) - E^*(\lambda) &= \frac{1}{2i\pi} \int_{C_\lambda} (\hat{H}(\lambda; h) - \zeta)^{-1} - (\hat{H}^*(\lambda; h) - \zeta)^{-1} \frac{d\zeta}{\zeta - \lambda} \\ &= \tilde{O}(e^{-(S_0^h - 2\tilde{S}_V^h + d(x, U^h) + d(y, \partial I)/h)}). \end{aligned}$$

De nouveau parce que λ n'est pas un pôle pour la résolvante de $\hat{H}(h)$, l'intégrale du membre du gauche de la dernière équation est nulle, ce qui donne le lemme. ■

■ **18.13. Corollaire.** *Le noyau de $[E(\lambda) - E^*(\lambda)]W^h(\tilde{H}(\lambda; h) - \lambda)^{-1*}$ est également $\tilde{O}(e^{-(S_0^h - 2\tilde{S}_V^h + d(x, U^h) + d(y, \partial I)/h)})$, uniformément en $\lambda \in [\lambda_j(h) - r^h/2; \lambda_j(h) + r(h)/2]$.*

Il reste enfin à estimer le dernier terme de N . On le récrit plutôt

$$\begin{aligned} &E^{+*}E^{-*}(\tilde{H}(\lambda; h) - \lambda)^{-1} - E^+E^-(\tilde{H}(\lambda; h) - \lambda)^{-1} \\ &= (E^{+*}(\lambda) - E^+(\lambda))E^{-*}(\lambda)(\tilde{H}^*(\lambda; h) - \lambda)^{-1} \\ &\quad + E^{-*}(\lambda)(E^{-*}(\lambda) - E^{-*}(\lambda))(\tilde{H}^*(\lambda; h) - \lambda)^{-1} \\ &\quad - 2i\pi E^+(\lambda)E^{-*}(\lambda) \frac{\partial \tilde{E}}{\partial \lambda}, \end{aligned}$$

et on conclut en se souvenant de ce que sont les opérateurs E^\pm et avec les estimations de décroissance du lemme 18.7 p.234. ■

Enfin, on note qu'avec le lemme 18.7, on peut remplacer pour tout $\lambda \Psi_j^h(\lambda)$ par ϕ_j^h sans modifier la taille du terme résiduel. Comme les estimations sont valables sur des petits intervalles autour de chaque λ_j^h qui recouvrent le segment $[\lambda_1^h - r^h; \lambda_n^h + r^h]$, cela achève la preuve du théorème 18.5.

18.3 Règle d'or de Fermi

La formule qui suit est en effet à rapprocher de la règle d'or de Fermi (cf. p.ex. [ReSi4]) au sens où elle donne une expression de la partie imaginaire de la résonance, c'est-à-dire de la largeur du pic en énergie de la formule du théorème 18.5. Elle s'obtient en calculant la mesure spectrale du Hamiltonien $H(h)$ associée à la fonction propre ϕ_j^h restreinte à l'île.

■ **18.14. Théorème.** *On suppose que l'hypothèse 18.3 est vérifiée, et on fixe $0 < \sigma < S_0/2 - \tilde{S}_U$. Fixons une valeur propre du problème de Dirichlet λ_j^h convergeant vers $\lambda \in \mathcal{E}_{rés}$, et notons*

$$z_j^h := E_j^h - i\Gamma_j^h, \quad \Gamma_j^h > 0, \quad \Gamma_j^h = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0^h/h}), \quad E_j^h \rightarrow \lambda.$$

Alors uniformément dans l'ensemble $\mathcal{L}_j^h := \{\lambda \in \mathbb{R} \mid |\lambda - E_j^h| \leq \Gamma_j^h e^{\sigma/h}\}$, on a

$$\Gamma_j^h = \frac{|\langle W^h \tilde{\psi}^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), \phi_j^h \rangle|^2}{4h\sqrt{\lambda}} + \frac{|\langle W^h \tilde{\psi}^h(-\sqrt{\lambda+B}; \cdot), \phi_j^h \rangle|^2}{4h\sqrt{\lambda+B}} + o(\Gamma_j^h).$$

Preuve. Par l'hypothèse 18.3, les ensembles \mathcal{L}_j^h sont deux à deux distincts, si bien que l'on peut supposer que $n = 1$. On calcule de deux façons la mesure spectrale $d\mu_j^h(\lambda)$ en restriction à $\mathcal{L}_j^h \subset \sigma_{ac}(H(h))$ du vecteur $u_j^h = \chi\phi_j^h / \|\chi\phi_j^h\|_{L^2(I)}$ associée à $H(h)$:

$$C_c(\mathcal{L}_j^h) \ni F \mapsto \langle u_j^h, F(H(h)) u_j^h \rangle.$$

On peut se restreindre à F positive ou nulle. Comme u_j^h est normalisé, si on désigne par Π_j^h le projecteur orthogonal sur la droite portée par u_j^h , on a

$$\langle u_j^h, F(H(h)) u_j^h \rangle = \text{Tr} \left[F(H(h)) \Pi_j^h \right] = \text{Tr} \left[\Pi_j^{h*} F(H(h)) \Pi_j^h \right], \quad (18.3.1)$$

la dernière égalité d'après $\Pi_j^h = (\Pi_j^h)^* = (\Pi_j^h)^2$ et par cyclicité de la trace. Sous cette forme, on voit que l'on peut appliquer le théorème de Mercer (p.99), puisque l'opérateur ci-dessus est auto-adjoint positif.

1. **Calcul par les fonctions du moment asymptotique.** les fonctions de l'énergie étant un cas particulier de fonctions du moment (cf. chap sur les états de diffusion p.57) la mesure $d\mu_j^h(\lambda)$ est à densité $\eta_j^h(\lambda)$ et celle-ci est donnée d'après (5.2.1) p.60 par

$$\begin{aligned} \eta_j^h(\lambda) &= \int_{I \times I} \left[\frac{\psi_-^h(\sqrt{\lambda}; x) \overline{\psi_-^h(\sqrt{\lambda}; y)}}{4\pi h \sqrt{\lambda}} u_j^h(x) u_j^h(y) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\psi_-^h(-\sqrt{\lambda+B}; x) \overline{\psi_-^h(-\sqrt{\lambda+B}; y)}}{4\pi h \sqrt{\lambda+B}} u_j^h(x) u_j^h(y) \right] dx dy \\ &= \frac{|\langle \psi_-^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), u_j^h \rangle_{L^2(I)}|^2}{4\pi h \sqrt{\lambda}} + \frac{|\langle \psi_-^h(-\sqrt{\lambda+B}; \cdot), u_j^h \rangle_{L^2(I)}|^2}{4\pi h \sqrt{\lambda+B}} \end{aligned} \quad (18.3.3)$$

ψ_-^h désignant les fonctions propres généralisées du Hamiltonien $H(h)$. Il est utile d'utiliser la relation (17.4.4) p.222 faisant intervenir sous l'hypothèse 18.3 les fonctions propres généralisées $\tilde{\psi}_-^h$ de $\tilde{H}(h)$, à savoir

$$\psi_-^h(k, \cdot) = \tilde{\psi}_-^h(k, \cdot) - (H(\lambda(k); h) - \lambda(k))^{-1} W^h \tilde{\psi}_-^h(k, \cdot), \quad (18.3.4)$$

$k \mapsto \lambda(k)$ désignant la relation de dispersion. On pose alors

$$\begin{aligned} a_+^h(\lambda) &:= \langle \psi_-^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), u_j^h \rangle_{L^2(I)}, & \tilde{a}_+^h(\lambda) &:= \langle \tilde{\psi}_-^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), u_j^h \rangle_{L^2(I)} \\ a_-^h(\lambda) &:= \langle \psi_-^h(-\sqrt{\lambda+B}; \cdot), u_j^h \rangle_{L^2(I)}, & \tilde{a}_-^h(\lambda) &:= \langle \tilde{\psi}_-^h(-\sqrt{\lambda+B}; \cdot), u_j^h \rangle_{L^2(I)} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} b_+(\lambda) &:= \langle (H(\lambda; h) - \lambda)^{-1} W^h \tilde{\psi}_-^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), u_j^h \rangle_{L^2(I)} \\ b_-(\lambda) &:= \langle (H(\lambda; h) - \lambda)^{-1} W^h \tilde{\psi}_-^h(-\sqrt{\lambda+B}; \cdot), u_j^h \rangle_{L^2(I)} \end{aligned}$$

de sorte que l'on a pour $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$

$$4\pi h \eta_j^h(\lambda) = \frac{|a_+^h(\lambda)|^2}{\sqrt{\lambda}} + \frac{|a_-^h(\lambda)|^2}{\sqrt{\lambda+B}} \quad (18.3.5)$$

$$a_{\pm}^h(\lambda) = \tilde{a}_{\pm}^h(\lambda) - b_{\pm}(\lambda) \quad (18.3.6)$$

qui conduisent avec des notations évidentes à

$$\begin{aligned} 4\pi h \eta_j^h(\lambda) &= 4\pi h \tilde{\eta}_j^h(\lambda) + \frac{|b_+^h(\lambda)|^2}{\sqrt{\lambda}} + \frac{|b_-^h(\lambda)|^2}{\sqrt{\lambda+B}} \\ &\quad - 2 \operatorname{Re} \left(\frac{\tilde{a}_+(\lambda) \overline{b_+(\lambda)}}{\sqrt{\lambda}} + \frac{\tilde{a}_-(\lambda) \overline{b_-(\lambda)}}{\sqrt{\lambda+B}} \right). \end{aligned} \quad (18.3.7)$$

Noter qu'avec les estimations de décroissance sur $\tilde{\psi}^h$ de la proposition 14.5 p.163 et le fait que la fonction u_j^h se concentre autour des points c_i , on a par Cauchy-Schwarz l'estimation uniforme en λ

$$\tilde{a}_{\pm}^h(\lambda) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0^h/h}). \quad (18.3.8)$$

2. **Avec la formule de Breit-Wigner.** D'après le théorème 18.5 et pour $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$, on a d'une part :

$$(H(\lambda; h) - \lambda - \lambda)^{-1} = E(\lambda) - \frac{1}{z_j^h - \lambda} E^+(\lambda) E^-(\lambda) \quad (18.3.9)$$

et d'autre part

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial \lambda}(x, y; \lambda; h) &= \frac{\partial \tilde{e}}{\partial \lambda}(x, y; \lambda; h) - \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\lambda - z_j^h} \phi_j^h(x) \phi_j^h(y) \\ &\quad + K_j(x, y; \lambda; h), \end{aligned}$$

le noyau résiduel K_j satisfaisant la même estimation que celle du noyau K du théorème 18.3. Cela donne que la densité $\eta_j^h(\lambda)$ est donnée par

$$\eta_j^h(\lambda) = \tilde{\eta}_j^h(\lambda) - \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\lambda - z_j^h} \left| \langle \phi_j^h, u_j^h \rangle \right|^2 + \langle K_j(\cdot; \lambda; h), u_j^h \otimes u_j^h \rangle_{L^2(I \times I)}. \quad (18.3.10)$$

Pour tout h les expressions (18.3.10) et (18.3.7) sont des fonctions continues de λ . Elles sont donc, au coefficient $4\pi h$ près, égales partout. Cela donne pour tout $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$,

$$\begin{aligned} &\frac{|b_+^h(\lambda)|^2}{\sqrt{\lambda}} + \frac{|b_-^h(\lambda)|^2}{\sqrt{\lambda+B}} - 2\text{Re} \left(\frac{\tilde{a}_+(\lambda) \overline{b_+(\lambda)}}{\sqrt{\lambda}} + \frac{\tilde{a}_-(\lambda) \overline{b_-(\lambda)}}{\sqrt{\lambda+B}} \right) \\ &= -4h \text{Im} \frac{1}{\lambda - z_j^h} \left| \langle \phi_j^h, u_j^h \rangle \right|^2 + 4\pi h \langle K_j(\cdot; \lambda; h), u_j^h \otimes u_j^h \rangle_{L^2(I \times I)}. \end{aligned} \quad (18.3.11)$$

À l'aide de (18.3.9), on précise l'expression de $b_{\pm}(\lambda)$

$$b_+^h(\lambda) = \langle E(\lambda) W^h \tilde{\psi}^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), u_j^h \rangle + \frac{1}{\lambda - z_j^h} \langle W^h \tilde{\psi}^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), \phi_j^h \rangle \langle u_j^h, \phi_j^h \rangle, \quad (18.3.12)$$

et on a une expression semblable pour $b_-^h(\lambda)$ en remplaçant $\sqrt{\lambda}$ par $-\sqrt{\lambda+B}$. Utilisant ensuite les estimations du noyau $E(\lambda)$ (cf. preuve du cor. 18.11) et les résultats de décroissance de $\phi_j^h, \tilde{\psi}^h$ et K_j , on a les estimations

$$\langle E(\lambda) W^h \tilde{\psi}^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), u_j^h \rangle, \langle E(\lambda) W^h \tilde{\psi}^h(-\sqrt{\lambda+B}; \cdot), u_j^h \rangle = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0^h - 2\tilde{S}_V^h)/h}) \quad (18.3.13)$$

$$\langle K_j(\cdot; \lambda; h), u_j^h \otimes u_j^h \rangle_{L^2(I \times I)} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(2S_0^h - 2\tilde{S}_V^h)/h}). \quad (18.3.14)$$

Cela donne alors pour $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$ par définition de $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$

$$(\lambda - z_j^h) b_+^h(\lambda) = \langle W^h \tilde{\psi}^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), \phi_j^h \rangle \langle u_j^h, \phi_j^h \rangle + \tilde{\mathcal{O}}(\Gamma_j e^{-(S_0^h - 2\tilde{S}_U^h - \sigma)/h}),$$

puis, en utilisant que $\langle W^h \tilde{\psi}^h(\cdot, \cdot), u^h - j \rangle = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0^h/h})$,

$$\begin{aligned} |(\lambda - z_j^h) b_+^h(\lambda)|^2 &= \left| \langle W^h \tilde{\psi}^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), \phi_j^h \rangle \langle u_j^h, \phi_j^h \rangle \right|^2 + \tilde{\mathcal{O}}(\Gamma_j e^{-(2S_0^h - 2\tilde{S}_U^h - \sigma)/h}) \\ &\quad + \tilde{\mathcal{O}}(\Gamma_j^2 e^{-(2S_0^h - 4\tilde{S}_U^h - 2\sigma)/h}), \end{aligned}$$

et même genre d'estimations pour $b_-^h(\lambda)$. D'autre part en multipliant le second membre de (18.3.11) par $|\lambda - z_j^h|^2$ on obtient avec l'estimation (18.3.14) et la définition de \mathcal{L}_j^h

$$\begin{aligned} &\frac{|b_+^h(\lambda)(\lambda - z_j^h)|^2}{\sqrt{\lambda}} + \frac{|b_-^h(\lambda)(\lambda - z_j^h)|^2}{\sqrt{\lambda + B}} \\ &\quad - 2|\lambda - z_j^h|^2 \operatorname{Re} \left(\frac{\tilde{a}_+(\lambda) \overline{b_+(\lambda)}}{\sqrt{\lambda}} + \frac{\tilde{a}_-(\lambda) \overline{b_-(\lambda)}}{\sqrt{\lambda + B}} \right) \\ &= 4h\Gamma_j \left| \langle \phi_j^h, u_j^h \rangle \right|^2 + \tilde{\mathcal{O}}(\Gamma_j^2 e^{-(2S_0^h - 2\tilde{S}_U^h - 2\sigma)/h}), \end{aligned} \quad (18.3.15)$$

et réexplicitant le membre de gauche de l'équation ci-dessus, on aboutit, après avoir simplifié par $|\langle u_j^h, \phi_j^h \rangle|^2 = 1 + o(1)$ à la formule suivante :

$$\begin{aligned} &\frac{|\langle W^h \tilde{\psi}^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), \phi_j^h \rangle|^2}{4h\sqrt{\lambda}} + \frac{|\langle W^h \tilde{\psi}^h(-\sqrt{\lambda + B}; \cdot), \phi_j^h \rangle|^2}{4h\sqrt{\lambda + B}} \\ &= \Gamma_j \left| \langle \phi_j^h, u_j^h \rangle \right|^2 + \tilde{\mathcal{O}}(\Gamma_j^2 e^{-(2S_0^h - 2\tilde{S}_U^h - 2\sigma)/h}) + \tilde{\mathcal{O}}(\Gamma_j^2 e^{-(2S_0^h - 2\tilde{S}_U^h - 2\sigma)/h}) \\ &= \Gamma_j + o(\Gamma_j), \end{aligned} \quad (18.3.16)$$

ce qui termine le calcul, et la preuve. \blacksquare

18.15. Remarque. Dans le cas du problème de Dirichlet, la mesure spectrale caculée est une mesure de Dirac centrée sur la valeur propre $\lambda_j(h)$. On obtient ici une version approchée de cette mesure pour le Hamiltonien $H(h)$ par une densité de Cauchy de paramètre Γ_j^h centrée en E_j^h , comme le montre (18.3.10).

18.4 Calcul de solutions quantiques

■ **18.16. Hypothèse.** On rappelle que l'on se met sous l'hypothèse 18.1. On fixe comme énergie résonante λ_* la plus petite énergie asymptotiquement résonante pour $H(h)$, et on suppose que sa multiplicité

asymptotique est égale au nombre total de puits, c'est-à-dire N . On suppose enfin que pour cette énergie on a

$$\tilde{S}_U < S_0/6.$$

18.17. Remarque. Par définition des énergies asymptotiquement résonantes, λ_* est bien définie (cf. notation 13.3 p.140 et déf. 13.5 p.141). De plus, avec l'hypothèse 2.2 p. 26, on est garanti du fait que $\lambda_* \in [\Lambda_*; \Lambda^*]$, domaine d'énergie auquel on s'est restreint dans tout le texte. Enfin, noter que $\lambda_1(h) \rightarrow \lambda_*$ est par hypothèse la plus petite valeur propre de $H_D(h)$.

L'expression (18.3.3) dans la preuve du théorème 18.14 suggère que les quantités suivantes pour $j = 1 \dots N$:

$$f_j^a(\lambda) := \langle W^h \tilde{\psi}^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), \phi_j^h \rangle, \quad f_j^b(\lambda) := \langle W^h \tilde{\psi}^h(-\sqrt{\lambda + B}; \cdot), \phi_j^h \rangle \quad (18.4.1)$$

doivent jouer un rôle dans l'asymptotique des fonctions du moment.

■ **18.18. Définition.** Soit $\lambda \in [\Lambda_*; \Lambda^*]$. On appelle densités de flux partiel par la gauche (resp. par la droite) les fonctions continues

$$j = 1 \dots N \quad \lambda \mapsto f_j^a(\lambda) \quad (\text{resp.} \quad \lambda \mapsto f_j^b(\lambda)).$$

18.19. Remarque. Ces fonctions sont bien continues en λ car les états de diffusion dépendent continûment de λ .

18.4.1 Réduction à une analyse puits par puits

L'hypothèse 18.16 autorise une analyse en énergie valeur propre de Dirichlet par valeur propre de Dirichlet (cf. prop. 17.26 p. 226). La plupart des résultats utilisés proviennent du théorème 13.19 p.146 sur l'asymptotique spectrale du problème multi-puits, et autorise une approche du même type en espace.

Pour $j = 1 \dots N$ soit $H_D^{\Omega_j}(h)$ la réalisation de Dirichlet de $P(h)$ l'ouvert Ω_j défini p.145, et soit μ_j^h la valeur propre correspondante convergeant vers λ_* avec un vecteur propre ψ_j^h unitaire assorti.

D'après la remarque p.150, on sait que les fonctions propres ϕ_j^h de $H_D(h)$ pour les valeurs propres voisines de λ_* (et il y en a exactement N linéairement indépendantes puisque la multiplicité de λ_* est N) s'obtiennent *via* une transformation linéaire quasi-isométrique définie sur le N -plan F engendré par les ψ_j^h . On a donc

■ **18.20. Proposition.** *Il existe une matrice unitaire $(a_{i,j}^h)_{1 \leq i,j \leq N}$ telle que dans $L^2(I)$ on a*

$$\forall j = 1 \dots N, \quad \phi_j^h = \sum_{i=1}^N a_{i,j}^h \psi_i^h + \tilde{O}(e^{-S_1/h}).$$

Autrement dit les densités $|\phi_j^h|^2$ sont, modulo un exponentiellement petit, des combinaisons convexes d'approximations des mesures δ_{c_j} .

18.21. Remarque.

1. Noter que la matrice $(a_{i,j}^h)$ est, à une perturbation exponentiellement petite près, l'inverse de la matrice de la projection orthogonale du sous-espace spectral de Dirichlet sur F (c'est bien en effet un isomorphisme linéaire).
2. Noter également qu'avec les estimations améliorées sur les fonctions propres (thm.13.22 p.153), on a une égalité ponctuelle du même type. Ceci étant, on commencera donc par étudier les quantités de (18.4.1) dans lesquelles les ϕ_j^h sont remplacées par les ψ_j^h .

■ **18.22. Définition.** *Soit $\lambda \in [\Lambda_*; \Lambda^*]$. On appelle pour $j = 1 \dots N$ densités de flux partiel local au j -ième puits la fonction continue définie par*

$$\Phi_j^a(\lambda) := \langle W^h \tilde{\psi}_-^h(\sqrt{\lambda}, \cdot), \psi_j^h \rangle_{L^2}$$

(resp. $\Phi_j^b(\lambda) := \langle W^h \tilde{\psi}_-^h(-\sqrt{\lambda+B}, \cdot), \psi_j^h \rangle_{L^2}$).

■ **18.23. Notation.** *On rappelle que pour $j = 1 \dots, N$ on note*

$$z_j^h := E_j^h - i\Gamma_j^h, \quad E_j^h \in \mathbb{R}, E_j^h \rightarrow \lambda_*, \quad \Gamma_j^h > 0.$$

les résonances autour de λ_ , et pour un paramètre $\sigma > 0$ qui sera fixé par la suite, on pose :*

$$\mathcal{L}_j^h := \{\lambda \in \mathbb{R} t.q. |\lambda - E_j^h| \leq \Gamma_j^h e^{\sigma/h}\}.$$

On démontrera plus tard (cf. partie 18.6.2) la

■ **18.24. Proposition.** *On se place sous l'hypothèse 18.16. Supposons en outre que le potentiel \tilde{V}^h est de classe C^2 sur I , et est uniformément borné par rapport à h dans $C^2(I)$. Fixons $j \in \{1 \dots N\}$, et soit λ un réel dans \mathcal{L}_j^h . Alors, pour $j = 1 \dots N$, il existe une constante $\alpha_j^\bullet(h)$ de limite non nulle telle que*

$$|\Phi_j^\bullet(\lambda)| \underset{h \rightarrow 0}{\sim} \alpha_j^\bullet(h) h^{1/2} e^{-\tilde{d}_j(\bullet, c_j)/h}, \quad (18.4.2)$$

où $\bullet = a, b$ et \tilde{d}_j est la distance d'Agmon pour le potentiel \tilde{V}^h à l'énergie E_j^h .

18.25. Remarque.

1. Ce résultat n'est pas surprenant dans la mesure où les fonctions propres généralisées décroissent exponentiellement à un taux mesuré par la distance d'Agmon du point d'entrée de l'onde sur l'île tandis que les fonctions ψ_j^h des problèmes à un puits se concentrent autour du puits en question. On peut faire aussi le lien avec la remarque p.222 en termes d'effet tunnel.
2. On verra dans la preuve de ce résultat que :

$$|\alpha_j^a(h)| \underset{h \rightarrow 0}{\sim} |C_a(\sqrt{\lambda_*})| |e_*^j|^{-1/4} \int_{-1}^1 w_j(x) \hat{\psi}_*(x) dx,$$

e_*^j étant la plus petite valeur propre de $-\Delta - w_j(x)$, sur \mathbb{R} , et ψ_* une fonction propre normalisée associée positive, et la constante C_a est celle de la proposition 18.39. Bien entendu, on a une expression similaire pour $\alpha_j^b(h)$. La positivité de la fonction propre est garantie par le fait que λ_* est la plus petite énergie résonante.

3. Dans le cadre purement linéaire de ce chapitre, la régularité supplémentaire demandée au potentiel, notamment par rapport à celle que l'on peut attendre dans le problème non-linéaire (cf. cor.10.19 p.114 et suivant) n'est pas restrictive. Elle permet d'écrire l'équivalent ci-dessus (cf. partie 18.6.1). Par ailleurs, cette situation, au demeurant assez générale, vise seulement à mettre en évidence des asymptotiques non triviales sur des exemples particuliers.

18.4.2 Le résultat précisé

Comme on le verra dans le théorème suivant, les flux partiels déterminent l'asymptotique des fonctions du moment. Le théorème 17.25 p. 226, qui est valide sous une hypothèse légèrement moins forte que l'hypothèse 18.16, peut être raffiné sous cette nouvelle hypothèse, notamment en considérant des situations non traitées jusqu'à présent, où les puits ne sont pas tous alimentés ou tous non-alimentés.

■ **18.26. Hypothèse.** On suppose en plus de l'hypothèse 18.16 que :

$$d_*(a, c_1) \leq d_*(c_1, b), \quad d_*(c_N, b) \leq d_*(a, c_N).$$

18.27. Remarque.

1. Autrement dit, en langage imagé, le premier puits est plus à gauche qu'à droite sur l'île (resp. plus à droite qu'à gauche), cf. figure 18.2.
2. Noter également que ce cas de figure n'entre pas dans les cas discutés dans les théorèmes 17.19 ou 17.25. Dans le cas d'un seul puits ($N = 1$), cette hypothèse signifie que le puits c_1 est à équidistance des points a et b . Ainsi, on traite complètement (pour la plus basse énergie résonante) le cas du potentiel à un puits.

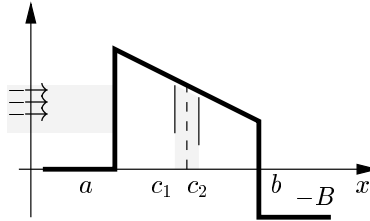


Figure 18.2. Les deux puits sont résonants et isolés à l'énergie λ_* tandis que seul c_1 est alimenté par la gauche.

Le résultat asymptotique de la proposition 18.24 suggère que la répartition de charges est déterminée par le rapport des flux partiels, ce qui incite à adopter un point de vue homogène. Cela conduit à poser :

■ **18.28. Notation.** Pour $1 \leq j \leq N$, et $\lambda > 0$, on pose

$$\theta_j^h(\lambda) := \mathbb{1}_{\mathcal{L}_j^h}(\lambda) \cdot \frac{f_j^a(\lambda)}{f_j^b(\lambda)} \equiv \frac{\mathbb{1}_{\mathcal{L}_j^h} \langle W^h \tilde{\psi}^h(\sqrt{\lambda}; \cdot), \phi_j^h \rangle}{\langle W^h \tilde{\psi}^h(-\sqrt{\lambda + B}; \cdot), \phi_j^h \rangle} \in \mathbb{C} \cup \{\infty\}.$$

Cette quantité est bien définie car les nombres $f_j^a(\lambda)$ et $f_j^b(\lambda)$ ne sont pas simultanément nuls :

■ **18.29. Lemme.** Pour $h > 0$ assez petit, et pour $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$, $\theta_j^h(\lambda)$ est bien défini.

Preuve. En effet d'après la règle d'or de Fermi (thm.18.14), on a la relation suivante, valable pour $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$:

$$\Gamma_j^h = \frac{|f_j^a(\lambda)|^2}{4h\sqrt{\lambda}} + \frac{|f_j^b(\lambda)|^2}{4h\sqrt{\lambda+B}} + o(\Gamma_j^h),$$

et comme $\Gamma_j^h > 0$, on a le résultat. ■

■ **18.30. Définition.** On définit sur \mathbb{R} , avec les notations de la proposition 18.20, et pour $1 \leq j \leq N$ la fonction τ_j^h par

$$\begin{aligned} \tau_j^h(\lambda) &:= \sum_{i=1}^N |a_{i,j}^h|^2 \frac{|\theta_i^h(\lambda)|^2}{\sqrt{\frac{\lambda}{\lambda+B}} + |\theta_i^h(\lambda)|^2} \in [0; 1] \text{ si } \theta_j^h(\lambda) \in \mathbb{C} \\ \tau_j^h(\lambda) &:= 1 \text{ sinon.} \end{aligned}$$

■ **18.31. Lemme.** Pour tout $h > 0$ assez petit, la fonction τ_j^h ainsi définie est continue sur \mathcal{L}_j^h .

Preuve. En dehors de l'ensemble des points λ_0 où $f_j^b(\lambda)$ est nulle, il est clair que τ_j^h est continue. Mais si λ tend vers un tel λ_0 , on voit que $|\theta_j^h(\lambda)|^2$ tend vers $+\infty$. On conclut en se souvenant que la matrice $(a_{i,j}^h)$ est unitaire. ■

On fixe une maintenant une fonction-test $g(k) \otimes \varphi(x)$ positive ou nulle, et on souhaite calculer les limites possibles de la famille de mesures définies par

$$\varphi \mapsto \text{Tr}[g(K-h)\varphi] \equiv \int_{k,x} |\psi_-^h(k,x)|^2 g(k) \varphi(x) \frac{dkdx}{2\pi h}. \quad (18.4.3)$$

D'après la proposition 17.4 p.217 et (17.1.5), on peut, sans perte de généralité, faire l'hypothèse suivante.

■ **18.32. Hypothèse.** Supposons que g est de la forme

$$g(k) = G(k^2) \cdot \mathbb{1}_{\{k>0\}}$$

la fonction $G(\lambda)$ étant supportée dans l'ensemble $\Lambda_\delta := [\lambda_* - \delta; \lambda_* + \delta] \subset [\Lambda_*; \Lambda^*]$, où $\delta > 0$ est fixé petit mais arbitrairement petit, de sorte que l'intervalle ne contienne que λ_* comme énergie résonante.

On a alors :

■ **18.33. Théorème.** *Toujours sous l'hypothèse 18.16. Soit $g(k)$ une fonction du moment fixée, comme dans l'hypothèse 18.32. On suppose que $\tilde{S}_U < S_0/6$, et que le potentiel \tilde{V}^h est de classe C^2 , et est uniformément borné par rapport à h dans $C^2(I)$. Considérons dn_g une valeur d'adhérence de la famille de mesures définies par (18.4.3). Alors dn_g est, en restriction à $]a; b[$, de la forme :*

$$dn_g = \sum_{j=1}^N t_j G(\lambda_*) \delta_{c_j}$$

et $(t_1 \dots t_N)$, est une valeur d'adhérence de la famille de vecteurs $\{(t_1^h \dots t_N^h)\}_{h>0}$, t_j^h étant donné par :

$$t_j^h := \int_{\mathbb{R}} \tau_j^h(\lambda) \frac{\Gamma_j^h}{(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h^2}} \frac{d\lambda}{\pi} \in [0; 1].$$

18.34. Remarque.

1. Ce résultat précise celui de la proposition 17.4 p.217 puisque les coefficients t_j^h sont donnés de façon plus explicite : ils s'obtiennent comme moyennes de la fonction τ_j^h , (à valeurs dans le segment $[0; 1]$), par la densité de Cauchy centrée en E_j^h et de paramètre Γ_j^h .
2. Si l'on montre que parmi les valeurs d'adhérence possible de la famille $\{(t_1^h \dots t_N^h)\}_{h>0}$, il en existe hors de l'ensemble $\{0, 1\}^N$, on aura mis ainsi en évidence la possibilité de solutions asymptotiques non-classiques. C'est l'objet de la section suivante.

Preuve. L'hypothèse ci-dessus autorise à utiliser la formule de Breit-Wigner et la règle d'or de Fermi (théorèmes 18.5 et 18.14). Soit $\varphi(x)$ une fonction-test de la position continue et positive ou nulle supportée dans un δ -voisinage du point c_j , mettons X_δ . En réexprimant la trace (18.4.3) en termes de λ , on a d'après la relation de dispersion

$$\text{Tr}[g(K - h)\varphi] = \int_{\Lambda_\delta \times X_\delta} \frac{|\psi_-^h(\sqrt{\lambda}, x)|^2}{4\pi h \sqrt{\lambda}} G(\lambda) \varphi(x) d\lambda dx. \quad (18.4.4)$$

Pour calculer cette quantité, on utilise la relation (18.3.4) p.240,

$$\psi_-^h(\sqrt{\lambda}, \cdot) = \tilde{\psi}_-^h(\sqrt{\lambda}, \cdot) - (H(\lambda; h) - \lambda)^{-1} W^h \tilde{\psi}_-^h(\sqrt{\lambda}, \cdot). \quad (18.4.5)$$

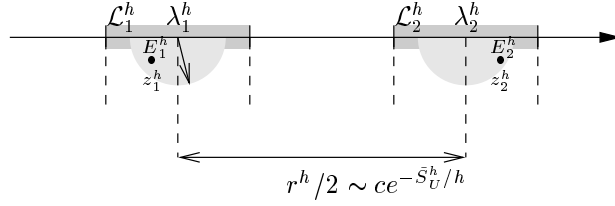


Figure 18.3. Découpage en λ avec la résolution Γ_j^h . En gris foncé : cas 1 (dont cas 1(a) en clair). En dehors, cas 2.

L'expression diagonalisée (18.2.9) p.236 suggère l'apparition d'une densité de Cauchy de paramètre Γ , la partie imaginaire de la résonance. Cela incite, avec le théorème 18.14 p.239 à effectuer une subdivision du domaine d'énergie adapté à la résolution Γ :

1. ■ $\lambda \in [\lambda_j^h - r^h/2; \lambda + r^h/2]$. On utilise la représentation de la résolvante du théorème 18.5

$$(H(\lambda; h) - \lambda)^{-1} = E(\lambda) - \frac{1}{\lambda - z_j^h} |\psi_j^h(\lambda)\rangle \langle \psi_j^h(\lambda)|, \quad (18.4.6)$$

le vecteur $\Psi_j^h(\lambda)$ ayant été défini dans le lemme 18.7 p.234 puis normalisé dans $L^2(I)$ (ce qui ne change pas l'estimation du lemme), et on récrit

$$\begin{aligned} \psi_-^h &= (\tilde{\psi}_-^h + E(\lambda)W^h\tilde{\psi}_-^h) - \frac{1}{\lambda - z_j^h} \langle \Psi_j^h(\lambda), W^h\tilde{\psi}_-^h \rangle \Psi_j^h(\lambda) \\ &\equiv A(\lambda, x) - \frac{1}{\lambda - z_j^h} B(\lambda, x), \end{aligned} \quad (18.4.7)$$

$E(\lambda)$ désignant l'inverse de la restriction de $H(\lambda; h) - \lambda$ à $\text{Vect} \{ \overline{\Psi_j^h(\lambda)} \}^\perp$.

Par suite pour $\lambda \in [\lambda_j^h - r^h/2; \lambda + r^h/2]$

$$\begin{aligned} |\psi_-^h(\sqrt{\lambda}, \cdot)|^2 &= |A(\lambda, x)|^2 + \frac{|B(\lambda, x)|^2}{(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}} \\ &\quad - 2\text{Re} \left(\bar{A}(\lambda, x) \frac{B(\lambda, x)(\lambda - E_j^h + i\Gamma_j^h)}{(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}} \right) \end{aligned} \quad (18.4.8)$$

Noter qu'avec la proposition 14.5 p.163 et l'inégalité de Cauchy-Schwarz d'une part, et avec le lemme 18.7 p.234 d'autre part on a uniformément en λ :

$$\forall x \in X_\delta, \quad |B(\lambda, x)| = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0^h/h}) |\phi_j^h(x)|. \quad (18.4.9)$$

Montrons d'abord que la contribution des premier et dernier termes de (18.4.8) est nulle. Traitons le premier terme de (18.4.8). Pour cela, on écrit que pour $x \in X_\delta$ et $\lambda \in [\lambda_j^h - r^h/2; \lambda_j^h + r^h/2]$:

$$\begin{aligned} \left| \tilde{\psi}_-^h(\sqrt{\lambda}, x) + [E(\lambda)W^h \tilde{\psi}_-^h(\sqrt{\lambda}, \cdot)](x) \right|^2 &\leq 2 \left| \tilde{\psi}_-^h(\sqrt{\lambda}, x) \right|^2 \\ &+ 2 \left| [E(\lambda)W^h \tilde{\psi}_-^h(\sqrt{\lambda}, \cdot)](x) \right|^2. \end{aligned}$$

On peut éliminer le premier terme du membre de droite de l'inégalité précédente d'après la proposition 17.12 p.219 sur l'asymptotique hors-équilibre pour les puits-bouchés. Quant au second terme, avec les estimations de décroissance de $\tilde{\psi}_-^h$ (prop. 14.5 p.163) et du noyau de $E(\lambda)$, (fin de la preuve du corollaire 18.11 p.237), on obtient après que pour $x \in S_\delta$ et uniformément en λ ,

$$|A(\lambda, x)| = \tilde{\mathcal{O}}(e^{(S_0^h - 2\tilde{S}_U^h)/h}), \quad (18.4.10)$$

et la contribution de ce terme dans l'intégrale (18.4.4) tend donc vers 0. Traitons ensuite le dernier terme de (18.4.8). Pour cela on développe

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \left(\bar{A}(\lambda, x) \frac{B(\lambda, x)(\lambda - E_j^h + i\Gamma_j^h)}{(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}} \right) &= \frac{(\lambda - E_j^h)}{(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}} \operatorname{Re} (\bar{A}B(\lambda, x)) \\ &- \frac{\Gamma_j^h}{(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}} \operatorname{Im} (\bar{A}B(\lambda, x)). \end{aligned}$$

On utilise ensuite la majoration suivante, découlant de (18.4.9) et (18.4.8)

$$\forall x \in X_\delta, \quad |A(\lambda, x)B(\lambda, x)| = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0^h - 2\tilde{S}_U^h)/h}) |\phi_j^h(x)|,$$

toujours uniformément en λ . Intégrons. Par Fubini, commençons par regarder l'intégrale en x . Puisque ϕ_j est bornée dans L^2 , on peut écrire avec la dernière majoration

$$\begin{aligned} \int_{X_\delta} |AB(\lambda, x)| &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0^h - 2\tilde{S}_U^h)/h}) \|\phi_j^h\|_{L^1} \\ &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0^h - 2\tilde{S}_U^h)/h}) \|\phi_j^h\|_{L^2} \\ &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0^h - 2\tilde{S}_U^h)/h}), \end{aligned}$$

et finalement, la contribution du troisième terme de (18.4.8) dans (18.4.4) est, en minorant $\sqrt{\lambda}$ par une constante non nulle indépendante de $h > 0$ (p. ex. $\sqrt{\Lambda_*}$)

$$\tilde{\mathcal{O}} \left(e^{-(S_0^h - 2\tilde{S}_U^h)/h} \int G(\lambda) \|\varphi\|_\infty \left(\frac{(\lambda - E_j^h)}{(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}} + \frac{\Gamma_j^h}{(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}} \right) d\lambda \right), \quad (18.4.11)$$

l'intégration se faisant sur $[\lambda_j^h - r^h/2; \lambda_j^h + r^h/2]$. Il est ensuite facile de voir que l'intégrale est bornée en h , ce qui donne bien que la contribution du troisième terme de (18.4.8) est nulle quand h tend vers 0.

Traisons ensuite le second terme de (18.4.8), qui est le terme prépondérant. Pour cela on subdivise la région d'énergie $\lambda \in \Lambda_j^h := [\lambda_j^h - r^h/2; \lambda_j^h + r^h/2]$ avec les notations du théorème 18.14 en

$$\Lambda_j^h = (\Lambda_j^h \setminus \mathcal{L}_j^h) \cup \mathcal{L}_j^h,$$

et on distingue donc deux sous-cas.

(a) $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$. La contribution correspondante dans (18.4.8) s'écrit

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{L}_j^h \times X_\delta} \frac{|B(\lambda, x)|^2 G(\lambda) \varphi(x)}{4\pi h \sqrt{\lambda} [(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}]} d\lambda dx \\ &= \int_{\mathcal{L}_j^h \times X_\delta} \frac{|\langle \psi_j^h(\lambda), W^h \tilde{\psi}_-^h \rangle \psi_j^h(\lambda)(x)|^2 G(\lambda) \varphi(x)}{4\pi h \sqrt{\lambda} [(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}]} d\lambda dx. \end{aligned}$$

Pour x dans le support de W^h , on peut, d'après le lemme 18.7 p.234, remplacer $\Psi_j^h(\lambda)$ par ϕ_j^h , ce qui introduit une erreur uniforme en λ :

$$|\langle \psi_j^h(\lambda), W^h \tilde{\psi}_-^h \rangle| = |\langle \phi_j^h, W^h \tilde{\psi}_-^h \rangle| + o(|\langle \phi_j^h, W^h \tilde{\psi}_-^h \rangle|),$$

la non-nullité de l'équivalent étant garantie par la proposition 18.24, vraie sous l'hypothèse 18.16. Par suite

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{L}_j^h \times X_\delta} \frac{|\langle \psi_j^h(\lambda), W^h \tilde{\psi}_-^h \rangle \psi_j^h(\lambda)(x)|^2 G(\lambda) \varphi(x)}{4\pi h \sqrt{\lambda} [(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}]} d\lambda dx \\ &= \int_{\mathcal{L}_j^h \times X_\delta} \frac{|\langle \phi_j^h, W^h \tilde{\psi}_-^h \rangle \phi_j^h(x)|^2 (1 + o(1)) G(\lambda) \varphi(x)}{4\pi h \sqrt{\lambda} [(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}]} d\lambda dx. \end{aligned}$$

Posons alors

$$t_a^h(\lambda) := \frac{|\langle \phi_j^h(\lambda), W^h \tilde{\psi}_-^h(\sqrt{\lambda}, \cdot) \rangle|^2}{4h\sqrt{\lambda}} = \frac{|f_j^a(\lambda)|^2}{4h\sqrt{\lambda}},$$

$$t_b^h(\lambda) := \frac{|\langle \phi_j^h(\lambda), W^h \tilde{\psi}_-^h(-\sqrt{\lambda+B}, \cdot) \rangle|^2}{4h\sqrt{\lambda+B}} = \frac{|f_j^b(\lambda)|^2}{4h\sqrt{\lambda+B}}$$

(remarquer que $t_a^h, t_b^h \geq 0$) si bien que l'intégrale ci-dessus s'écrit

$$\int_{\mathcal{L}_j^h \times X_\delta} \frac{t_a^h(\lambda) G(\lambda)}{\pi[(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}]} |\phi_j^h(x)|^2 \varphi(x) (1+o(1)) d\lambda dx. \quad (18.4.12)$$

D'après l'expression de Γ_j^h dans \mathcal{L}_j^h (thm. 18.14) on a uniformément en $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$

$$0 < \Gamma_j^h = t_a^h(\lambda) + t_b^h(\lambda) + o(\Gamma_j^h), \quad (18.4.13)$$

et le terme principal de (18.4.12) devient

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{L}_j^h \times X_\delta} \frac{t_a^h(\lambda)}{(t_a^h(\lambda) + t_b^h(\lambda))} \frac{\Gamma_j^h G(\lambda)}{\pi[(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}]} |\phi_j^h(x)|^2 \varphi(x) d\lambda dx \\ &= \int_{\mathcal{L}_j^h} \frac{|f_j^a(\lambda)|^2}{|f_j^a(\lambda)|^2 + \sqrt{\frac{\lambda}{\lambda+B}} |f_j^b(\lambda)|^2} G(\lambda) \mathcal{C}_j(\lambda) d\lambda \int_{X_\delta} |\phi_j^h(x)|^2 \varphi(x) dx, \end{aligned}$$

où on a noté $\mathcal{C}_j(\lambda)$ la densité de Cauchy de paramètre Γ_j^h et centrée en E_j^h . Par ailleurs, noter que pour tout $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$ la fraction sous la première intégrale est égale à

$$\frac{|\theta_i^h(\lambda)|^2}{\sqrt{\frac{\lambda}{\lambda+B}} + |\theta_i^h(\lambda)|^2}.$$

Utilisant enfin la décomposition de ϕ_j^h de la proposition 18.20, et écrivant que pour $h > 0$ assez petit, $G(\lambda) = G(\lambda_*) + o(1)$, on obtient bien que

$$\int_{\mathcal{L}_j^h \times X_\delta} \frac{|\psi_-^h(\sqrt{\lambda}, x)|^2}{4\pi h \sqrt{\lambda}} G(\lambda) \varphi(x) d\lambda dx = t_j^h G(\lambda_*) + o(1).$$

(b) $\lambda \notin \mathcal{L}_j^h$. On utilise le lemme facile suivant :

■ **18.35. Lemme.** Soit $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite réelle convergeant vers $x_\infty \in \mathbb{R}$ et ε_n une suite de réels positifs de limite nulle. Soit $(a_n), (b_n)$ deux suites de réels > 0 telles que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_n}{a_n} = +\infty, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{\varepsilon_n} = +\infty.$$

Alors on a

$$\int_{x_n + a_n}^{x_n + b_n} \frac{\varepsilon_n dx}{(x - x_n)^2 + \varepsilon_n^2} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\varepsilon_n}{a_n}.$$

On revient à l'expression (18.4.12) dans laquelle cette fois l'intégration se fait sur $(\Lambda_j^h \setminus \mathcal{L}_j^h) \times X_\delta$. On utilise alors le fait que l'on a pour ces λ $t_a^h(\lambda) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0^h/h})$ et on écrit de même que précédemment :

$$\frac{t_a^h(\lambda)}{\pi[(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}]} = \frac{t_a^h(\lambda)}{\Gamma_j^h} \frac{\Gamma_j^h}{\pi[(\lambda - E_j^h)^2 + \Gamma_j^{h2}]}$$

et on utilise la minoration de Γ_j^h du théorème 15.27 p.194, ce qui donne

$$\frac{t_a^h(\lambda)}{\Gamma_j^h} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{2S_U^h/h}), \quad h \rightarrow 0.$$

L'intégrale en x étant clairement $\mathcal{O}(1)$, on obtient avec le lemme énoncé précédemment que l'intégrale est $\tilde{\mathcal{O}}(e^{2S_U^h/h - \sigma/h})$. Mais avec l'hypothèse du théorème, on peut choisir $\sigma > 0$ vérifiant simultanément, puisque $\tilde{S}_U \geq S_U$:

$$\sigma < S_0/2 - \tilde{S}_U, \quad \sigma > 2S_U,$$

et la contribution de l'intégrale sur $(\Lambda_j^h \setminus \mathcal{L}_j^h) \times X_\delta$ est bien nulle.

2. ■ $\lambda \notin [\lambda_j^h - r^h/2; \lambda + r^h/2]$. Dans ce cas le noyau de $(H(\lambda; h) - \lambda)^{-1}$ est uniformément $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-(d(x,y) - 2\tilde{S}_U^h)/h})$. En effet, pour ces λ , un problème de Grushin pour lequel le bloc de dimension finie est nul. Dans ce cas, l'expression de (18.4.6) se réduit à $E(\lambda)$, et la contribution de l'intégrale (18.4.4) pour ces λ s'évalue de la même façon que le pour le premier terme de (18.4.7) : elle est bien nulle et cela termine la preuve.

■

18.5 Calculs explicites

Pour ces calculs particuliers, on prendra pour tout $h > 0$ le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h$ égal à un potentiel constant sur I :

$$\forall h > 0, \quad \forall x \in I, \quad \tilde{\mathcal{V}}^h(x) \equiv V_0 > 0.$$

18.5.1 Le cas d'un puits

On aurait pu directement traiter le cas de deux puits, mais on explicite ce cas pour traiter assez complètement le cas du problème à un puits (cf. corollaire 17.22 p.225, qui est un résultat partiel).

■ **18.36. Théorème.** *On fait l'hypothèse 18.16. Pour l'énergie asymptotiquement résonante λ_* , les limites possibles de la famille de mesures $\{dn_g[K_-^h]\}_{h>0}$ sont de la forme*

$$dn_g[K_-^0] = t\delta_{c_1}, \quad \text{avec}$$

- i) $t = 0$ si $d(a; c_1) > d(c_1; b)$
- ii) $t = 1$ si $d(a; c_1) < d(c_1; b)$
- iii) $t \in]0; 1[$ si $d(a; c_1) = d(c_1; b)$.

Preuve. Les cas (i) et (ii) ont déjà été vus dans le corollaire 17.22 p.225. Pour le cas (iii), on applique le théorème 18.33 : puisque $N = 1$, la matrice $(a_{i,j}^h)$ est réduite à un nombre complexe de module 1, et la distance d'Agmon prend l'expression très simple :

$$\forall x, y \in I, \quad \tilde{d}_1(x; y) = S(h)|x - y|, \quad S(h) = \sqrt{V_0 - \lambda_1(h)}.$$

Par ailleurs, avec les notations 18.28, on a par la proposition 18.24

$$\theta_1^h(\lambda) \underset{h \rightarrow 0}{\sim} \frac{\Phi_1^a(\lambda)}{\Phi_1^b(\lambda)} \underset{h \rightarrow 0}{\sim} \frac{\alpha_1^a}{\alpha_1^b} e^{-(\tilde{d}_1(a, c_1) - \tilde{d}_1(c_1, b))/h}, \quad \alpha_1^a \alpha_1^b \neq 0,$$

et ce, uniformément en $\lambda \in \mathcal{L}_1^h$.

La distance d'Agmon étant différentiable par rapport à l'énergie, on peut écrire, pour $\lambda \in \mathcal{L}_1^h$, par une formule de Taylor, et uniformément en $x, y \in I, x \leq y$

$$\tilde{d}_1(x, y) = \tilde{d}_*(x, y) - \frac{1}{2\sqrt{V_0 - \lambda_*}}(y - x)(\lambda_1(h) - \lambda_*) + \mathcal{O}((\lambda_1(h) - \lambda_*)^2). \quad (18.5.1)$$

L'égalité asymptotique des distances d'Agmon se traduit par le fait que $|b - c_1| = |c_1 - a|$, et comme on a, d'après la remarque à la fin de la preuve du théorème 12.9 p.128

$$\lambda_* = \lambda_1(h) + \mathcal{O}_\alpha(h^{2\alpha}), \quad \alpha \in]0, 1[,$$

on en déduit que pour tout $\lambda \in \mathcal{L}_1^h$,

$$\theta_1^h(\lambda) \xrightarrow{h \rightarrow 0} \theta_0 \in \mathbb{C}^*.$$

Quant à la fonction $\tau_1^h(\lambda)$, celle-ci s'écrit sur \mathcal{L}_j :

$$\tau_1^h(\lambda) = \frac{|\theta_1(\lambda)|^2}{\sqrt{\frac{\lambda}{\lambda+B}} + |\theta_1(\lambda)|^2} \in [0; 1],$$

on conclut en appliquant le théorème 18.33. ■

18.5.2 Le cas de deux puits

D'après les faits rappelés dans la partie 18.4.1 sur les décompositions suivantes des fonctions propres de $H_D(h)$ dans $L^2(I)$, on a

$$\phi_1^h = p_{1,1}^h \psi_1(h) + p_{1,2}^h \psi_2(h) + \tilde{O}(e^{-S_U/h}) \quad (18.5.2)$$

$$\phi_2^h = p_{2,1}^h \psi_1(h) + p_{2,2}^h \psi_2(h) + \tilde{O}(e^{-S_U/h}) \quad (18.5.3)$$

la matrice de coefficient général $p_{i,j}^h$ n'étant autre que l'inverse de la matrice de la projection orthogonale de F sur le sous-espace spectral de $H_D(h)$ autour de λ_* . Noter en effet que dans le cas de deux puits on a $S_U = S_1$. Quitte à permuter $\psi_1(h)$ et $\psi_2(h)$, écrivons :

$$\begin{pmatrix} p_{1,1}^h & p_{1,2}^h \\ p_{2,1}^h & p_{2,2}^h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi^h & -\sin \varphi^h \\ \sin \varphi^h & \cos \varphi^h \end{pmatrix} + \tilde{O}(e^{-S_U/h}), \varphi^h \in]-\pi; \pi]. \quad (18.5.4)$$

Les flux partiels sont reliés aux flux partiels locaux par les relations linéaires

$$\begin{pmatrix} f_1^a(\lambda) & f_2^a(\lambda) \\ f_1^b(\lambda) & f_2^b(\lambda) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_1^a(\lambda) & \Phi_2^a(\lambda) \\ \Phi_1^b(\lambda) & \Phi_2^b(\lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{1,1}^h & p_{2,1}^h \\ p_{1,2}^h & p_{2,2}^h \end{pmatrix}. \quad (18.5.5)$$

Par définition des θ_j^h (cf. notation 18.28), cela conduit à considérer l'action de l'homographie de $\mathbb{P}^1(\mathbb{C})$ de matrice :

$$\begin{pmatrix} \Phi_1^a(\lambda) & \Phi_2^a(\lambda) \\ \Phi_1^b(\lambda) & \Phi_2^b(\lambda) \end{pmatrix}$$

sur les points de coordonnées homogènes $[p_{j,1}^h : p_{j,2}^h]$.

■ 18.37. Proposition. Soit $\tan \varphi_0$ une valeur d'adhérence de la famille $(\tan \varphi^h)_{h>0}$ et supposons que $\tan \varphi_0 \in \mathbb{R}^*$. Soit d_* la distance d'Agmon pour le potentiel limite $\tilde{\mathcal{V}}^0$ à l'énergie λ_* . Pour $j = 1, 2$ et uniformément en λ dans \mathcal{L}_j^h :

- (i) Si $d_*(c_2, b) > d_*(a, c_1)$, alors $\theta_j^h(\lambda) \rightarrow \infty$.
- (ii) Si $d_*(c_2, b) < d_*(a, c_1)$, alors $\theta_j^h(\lambda) \rightarrow 0$.
- (iii) Si $d_*(c_2, b) = d_*(a, c_1)$, alors $\theta_j^h(\lambda) \rightarrow \theta_j^o \in \mathbb{C}^*$.

En particulier dans le cas (iii), les coefficients t_j du théorème 18.33 sont dans l'intervalle $]0; 1[$.

Preuve. Noter que d'après (18.5.4), on a

$$\begin{pmatrix} p_{1,1}^h & p_{1,2}^h \\ p_{2,1}^h & p_{2,2}^h \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \cos \varphi_0 & -\sin \varphi_0 \\ \sin \varphi_0 & \cos \varphi_0 \end{pmatrix}, \quad (18.5.6)$$

on peut, pour $h > 0$ assez petit, quitte à renormaliser les points projectifs $[p_{j,1}^h : p_{j,2}^h]$, supposer que

$$[p_{1,1}^h : p_{1,2}^h] = [1 : \tan \Phi^h], \quad [p_{2,1}^h : p_{2,2}^h] = [-\tan \tilde{\Phi}^h : 1]$$

et

$$\Phi^h \in]-\pi/2; \pi/2], \quad \tan \Phi^h, \tan \tilde{\Phi}^h \rightarrow \tan \varphi_0.$$

Par définition, on a pour λ dans \mathcal{L}_1^h

$$\theta_1^h(\lambda) := \frac{f_1^a(\lambda)}{f_1^b(\lambda)} = \frac{\Phi_1^a(\lambda) + \Phi_2^a(\lambda) \tan \Phi^h}{\Phi_1^b(\lambda) + \Phi_2^b(\lambda) \tan \Phi^h}, \quad (18.5.7)$$

et on a une expression du même type pour $\theta_2^h(\lambda)$.

Utilisant la proposition 18.24 et mettant en facteur les termes principaux par hypothèse 18.26, on obtient, après simplification par $h^{1/2}$:

$$\theta_1(\lambda) \underset{h \rightarrow 0}{\sim} \frac{\alpha_1^a}{\alpha_2^b} e^{(\tilde{d}_1(c_2, b) - \tilde{d}_1(a, c_1))/h} \frac{1 + \tan \Phi^h \alpha_2^a / \alpha_1^a e^{-(\tilde{d}_1(a, c_2) - \tilde{d}_1(a, c_1))/h}}{\tan \Phi^h + \alpha_1^b / \alpha_2^b e^{-(\tilde{d}_1(c_1, b) - \tilde{d}_1(c_2, b))/h}}, \quad (18.5.8)$$

et on a encore une expression similaire pour $\theta_2^h(\lambda)$, puisque $\tan \varphi_0 \notin \{0, \infty\}$. Remarquer enfin que les exponentielles du dernier facteur dans l'équivalent se réduisent à $e^{-S_U/h}$.

Sous cette forme, on voit donc que pour $j = 1, 2$ les conclusions de la proposition sont immédiates, puisque l'on a encore (18.5.1). Pour ce qui est des valeurs des coefficients τ_i^h , ceux-ci sont reliés dans le cas $N = 2$ aux θ_j^h par

$$\begin{aligned} \tau_1^h(\lambda) &= \cos^2 \varphi^h \frac{|\theta_1(\lambda)|^2}{\sqrt{\frac{\lambda}{\lambda+B}} + |\theta_1(\lambda)|^2} + \sin^2 \varphi^h \frac{|\theta_2(\lambda)|^2}{\sqrt{\frac{\lambda}{\lambda+B}} + |\theta_2(\lambda)|^2} \\ \tau_2^h(\lambda) &= \sin^2 \varphi^h \frac{|\theta_1(\lambda)|^2}{\sqrt{\frac{\lambda}{\lambda+B}} + |\theta_1(\lambda)|^2} + \cos^2 \varphi^h \frac{|\theta_2(\lambda)|^2}{\sqrt{\frac{\lambda}{\lambda+B}} + |\theta_2(\lambda)|^2}. \end{aligned}$$

Cela achève la preuve. ■

18.38. Remarque.

1. L'hypothèse sur φ_0 correspond au cas où les fonctions propres à la limite restent délocalisées dans les puits. Ce cas de figure n'est pas vide, puisqu'il arrive dans le cas du double puits symétrique par exemple.
2. On pourrait aussi prouver que dans le cas où $\alpha \in \{0, 1\}$ les valeurs limites des θ_j peuvent ne pas être dans $\{0, \infty\}$: il suffit pour cela d'être plus complet dans la comparaison des ordres de grandeur de $\tan \Phi^h$ et de $e^{-S_U/h}$. Toutefois, le résultat établi suffit à prouver l'existence éventuelle de solutions quantiques.

3. Ces calculs certes particuliers visent également à justifier l'approche algorithmique présentée dans [NiPa]. Par des simulations numériques faites dans le cas de deux puits, les résultats obtenus suggèrent la présence de solutions stationnaires asymptotiques non-classiques. On renvoie le lecteur à ce texte pour la description de ces algorithmes et la confrontation des résultats qualitatifs obtenus avec ceux de [PrSj].

18.6 Preuve de résultats auxiliaires

18.6.1 Approximation WKB des états de diffusion

Observant (18.4.1), on commence par dégager le terme principal dans le résultat asymptotique de la proposition 14.5 p.163 sur les fonctions propres généralisées pour le problème des puits bouchés. L'île étant semi-classique, cela se fait par un développement WKB des fonctions $\tilde{\psi}_-(k, \cdot)$:

■ **18.39. Proposition.** *Mêmes hypothèses et notations que celles de la proposition 14.5 p. 163. Si l'on suppose que le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h$ est C^2 , il existe une constante non nulle $C_\bullet(k)$ telle que pour tout $x \in I$:*

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_-^h(k, x) &= \frac{C_a(k)}{(\tilde{\mathcal{V}}^h(x) - \lambda(k))^{1/4}} e^{-\tilde{d}(a,x)/h} (1 + o(1)) \quad \text{si } k > 0 \\ \tilde{\psi}_-^h(k, x) &= \frac{C_b(k)}{(\tilde{\mathcal{V}}^h(x) - \lambda(k))^{1/4}} e^{-\tilde{d}(b,x)/h} (1 + o(1)) \quad \text{si } k < 0 \quad ,\end{aligned}$$

les constantes étant données par

$$\begin{aligned}C_a(k) &= -\frac{2ik e^{ika/h} \sigma_a^{1/2}}{\sigma_a - ik}, \quad \sigma_a := (\tilde{\mathcal{V}}^h(a) - k^2)^{1/2} \\ C_b(k) &= -\frac{2ik e^{iba/h} \sigma_b^{1/2}}{\sigma_b + ik}, \quad \sigma_b := (\tilde{\mathcal{V}}^h(b) - k^2 + B)^{1/2},\end{aligned}$$

et \tilde{d} désignant la distance d'Agmon à l'énergie $\lambda(k)$ pour le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h$.

18.40. Remarque. Avec la normalisation des états de diffusion et (14.2.5) p.165, on sait en effet que pour tout $h > 0$, $C(k)$ est non nulle. Ici la constante est explicitée. Le résultat de cette proposition est à rapprocher de ceux obtenus dans le cas où le potentiel est constant sur I (cf. prop.6.10 p.65).

Preuve. Rappelons brièvement le principe de la méthode WKB (cf. pour plus de détails [Me1] et [He], ou encore [DiSj]) : elle consiste à chercher une solution approchée de l'équation

$$\left(-h^2 \frac{d^2}{dx^2} + \tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(k)\right) \tilde{\psi}_-^h(k, \cdot) = 0, \quad (18.6.1)$$

$\lambda(k)$ étant donné par la relation de dispersion (5.1.3) p.58, obtenue en posant *a priori*

$$\tilde{\psi}_-(k, x) := A(x; h) e^{S(x)/h}, \quad (18.6.2)$$

l'amplitude A et la phase S étant à déterminer. Typiquement, A est cherché sous forme d'un symbole formel développé en puissances de h . On se limitera à l'ordre un dans notre situation :

$$A(x; h) := a_0(x) + a_1(x)h. \quad (18.6.3)$$

L'équation (18.6.1) dans laquelle $\tilde{\psi}_-^h(k, \cdot)$ est remplacée par son ansatz (18.6.3) fournit, par annulation des termes d'ordre h^j , une équation eiconale satisfaite par S ($j = 0$), et une équation, dite de transport, satisfaite par les a_j . On vérifie *a posteriori*, en utilisant les propriétés de l'équation différentielle que l'approximation obtenue ainsi est bonne.

Faisons le calcul pour $\lambda(k) \in [\lambda - \delta; \lambda + \delta]$, et pour $k > 0$ (et donc $\lambda(k) = k^2$). Il serait identique pour $k < 0$ en échangeant les rôles de a et b . On se contentera pour nos besoins d'un développement à l'ordre 1, c'est-à-dire :

$$A(x) := a_0(x) + ha_1(x).$$

On a en conjuguant par la phase et pour $j = 0, 1$:

$$\begin{aligned} -h^2 \frac{d^2}{dx^2} (a_j e^{S/h}) &= -e^{S/h} \left[h \frac{d}{dx} + S' \right]^2 a_j \\ &= -e^{S/h} (h^2 a_j'' + 2S' h a_j' + S'^2 + h S'' a_j). \end{aligned}$$

Pour cela, il faut supposer que le potentiel est au moins deux fois dérivable, ce que l'on fait dans un premier temps. Par suite (18.6.1) devient par linéarité :

$$\begin{aligned} (\tilde{P}(h) - k^2) A(x) e^{S/h} &= e^{S/h} \left[-h^0 (\tilde{\mathcal{V}}^h - S'^2 - \lambda(k)) a_0 \right. \\ &\quad + h^1 [2S' a_0' + S'' a_0 - ((\tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(k)) - S'^2) a_1] \\ &\quad + h^2 [a_0'' + 2S' a_1' + S'' a_1] \\ &\quad \left. + h^3 a_1'' \right]. \end{aligned} \quad (18.6.4)$$

On veut annuler le terme d'ordre zéro. On obtient l'équation eiconale :

$$S'^2 = \tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(k),$$

ce qui donne deux choix possibles pour S , mettons, pour fixer les constantes d'intégration

$$S(x) := \pm \int_a^x \sqrt{\tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(k)} dt \quad \text{si } k > 0, \quad (18.6.5)$$

$$S(x) := \pm \int_b^x \sqrt{\tilde{\mathcal{V}}^h - \lambda(k)} dt \quad \text{si } k < 0. \quad (18.6.6)$$

Il s'agit bien entendu au signe près de la distance d'Agmon à l'énergie $\lambda(k)$ pour le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h$ entre x et le point d'entrée de l'onde $\tilde{\psi}(k, \cdot)$ dans l'île. Noter également que l'argument de la racine est positif, et que la dérivée de S ne s'annule pas. L'annulation du terme d'ordre un fournit l'équation linéaire :

$$2S'a'_0 + S''a_0 = 0,$$

qui s'intègre aisément après avoir mis en facteur $2\sqrt{|S'|}$. On obtient donc

$$a_0(x) = \frac{C_0(k)}{\sqrt{|S'(x)|}} = \frac{C_0(k)}{(\tilde{\mathcal{V}}^h(x) - \lambda(k))^{1/4}},$$

pour une constante $C_0(k)$. Enfin l'annulation du terme d'ordre deux donne

$$\frac{d}{dx} \frac{a_1}{\sqrt{|S'|}} = -\frac{a''_0}{2\sqrt{|S'|}}, \quad (18.6.7)$$

qui s'intègre aussi pour donner

$$a_1(x) = \sqrt{|S'|} \left[C_1(k) - \int_a^x \frac{a''_0}{2\sqrt{|S'|}} dt \right]. \quad (18.6.8)$$

Noter que si on pose

$$F(x) := \frac{1}{2}|S'(x)|^{-1/2},$$

on voit que

$$a_1(x) = \sqrt{|S'|} \left[C_1(k) - 2C_0(k) \int_a^x F F''(x) dt \right], \quad (18.6.9)$$

expression qui, une fois intégrée par parties ne fait intervenir que $\tilde{\mathcal{V}}^h$ et sa dérivée.

On décide ensuite de combiner les deux solutions WKB obtenues respectivement avec $S = \tilde{d}(a, \cdot)$ et $S = -\tilde{d}(a, \cdot)$ ($k > 0$). On pose donc avec des notations évidentes

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_-^*(k, x) &:= a_0^- e^{-\tilde{d}(a, x)/h} + a_0^+ e^{\tilde{d}(a, x)/h} + h[a_1^+ e^{\tilde{d}(a, x)/h} + a_1^- e^{-\tilde{d}(a, x)/h}] \\ &\equiv A_0(x) + hA_1(x). \end{aligned} \quad (18.6.10)$$

On choisit de normaliser les fonctions $a_j^\pm(x)$ de la même façon que $\tilde{\psi}_-^h$. Précisément

$$hA_0'(a) + ikA_0(a) = 2ike^{ika/h}(1-h) \quad \text{et} \quad hA_0'(b) - i\sqrt{k^2 + B}A_0(b) = 0, \quad (18.6.11)$$

$$hA_1'(a) + ikA_1(a) = 2ike^{ika/h} \quad \text{et} \quad hA_1'(b) - i\sqrt{k^2 + B}A_1(b) = 0, \quad (18.6.12)$$

si bien que la fonction $u := \tilde{\psi}_-^* - \tilde{\psi}_-$ vérifie :

$$hu'(a) = -iku(a), \quad hu'(b) = -i\sqrt{k^2 + B}u(b). \quad (18.6.13)$$

Cette normalisation conduit ensuite à résoudre deux systèmes linéaires de deux équations à deux inconnues $C_0^\pm(k)$, $j = 0, 1$. Pour $j = 0$ cela donne, en posant

$$\tilde{S}_I := \tilde{d}(a; b), \quad \sigma_\bullet := \sqrt{\mathcal{V}^h(\bullet) - k^2}, \quad \varepsilon_\bullet := \frac{S''(\bullet)}{\sigma_\bullet}, \quad \bullet = a, b,$$

un système très semblable à celui obtenu dans le cas du potentiel constant (cf. prop.6.10 p.65) :

$$M \begin{pmatrix} C_0^-(k)/\sigma_a^{1/2} \\ C_0^+(k)/\sigma_a^{1/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2ike^{ika/h} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (18.6.14)$$

où la matrice du système M est donnée par

$$\begin{pmatrix} -\sigma_a + ik - h\varepsilon_a & \sigma_a + ik - h\varepsilon_a \\ (-\sigma_b - i\sqrt{k^2 + B} - h\varepsilon_b)e^{-\tilde{S}_I/h} & (\sigma_b - i\sqrt{k^2 + B} - h\varepsilon_b)e^{\tilde{S}_I/h} \end{pmatrix}. \quad (18.6.15)$$

Le déterminant du système est

$$\det M = -e^{\tilde{S}_I/h}(\sigma_a - ik)(\sigma_b - i\sqrt{k^2 + B})(1 + \mathcal{O}(h)), \quad h \rightarrow 0,$$

dont on sait qu'il est non nul puisque l'opérateur $\tilde{P}(h)$ n'a pas de résonances. Cela donne, uniformément par rapport à k :

$$\begin{aligned} C_0^-(k) &= \sigma_a^{1/2} \frac{2ike^{ika/h}(\sigma_b - i\sqrt{k^2 + B} - h\varepsilon_b)e^{\tilde{S}_I/h}}{\det M} \\ &= -\frac{2ike^{ika/h}\sigma_a^{1/2}}{\sigma_a - ik}(1 + \mathcal{O}(h)), \quad h \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (18.6.16)$$

et

$$\begin{aligned} C_0^+(k) &= \sigma_b^{1/2} \frac{2ike^{ika/h}(\sigma_b + i\sqrt{k^2 + B} + h\varepsilon_b)(\sigma_a + ik - h\varepsilon_a)}{\det M} \\ &= e^{-2\tilde{S}_I/h} \frac{2ike^{ika/h}\sigma_b^{1/2}}{(\sigma_a - ik)(\sigma_b - i\sqrt{k^2 + B})}(1 + \mathcal{O}(h)). \end{aligned} \quad (18.6.17)$$

Noter en particulier que $C_0^+(k)$ est exponentiellement petit. Pour $j = 1$ on obtient un système formellement semblable au précédent, puisque les fonctions a_1^\pm , sont, regardant (18.6.9), uniformément bornées en $x, k, h \rightarrow 0$. Cela donne donc

$$C_1^-(k) = \mathcal{O}(1), \quad C_1^+(k) = \mathcal{O}(e^{-2\tilde{S}_I/h}) \quad (18.6.18)$$

À présent on montre que $\tilde{\psi}_-^*$ et une bonne approximation uniforme sur I de $\tilde{\psi}_-$. Appliquons pour cela le lemme 8.1 p.87 avec

$$V = \tilde{\mathcal{V}}, \quad z = k^2, \quad \varphi = \tilde{d}(a, \cdot), \quad u = v = \tilde{\psi}_-^* - \tilde{\psi}_-.$$

Cela donne, en prenant les parties réelles, et compte tenu des conditions aux limites mixtes homogènes (18.6.13) :

$$\int_a^b e^{\tilde{d}(a, \cdot)/h} (\tilde{P}(h) - k^2) u \cdot e^{\tilde{d}(a, \cdot)/h} \bar{u} = \|h(e^{\tilde{d}(a, \cdot)/h} u)'\|_{L^2}^2. \quad (18.6.19)$$

Comme les conditions aux bord vérifiées par u sont mixtes homogènes Par construction WKB de $\tilde{\psi}_-^*$ on a,

$$(\tilde{P}(h) - \lambda(k))u = -h^3(a_1^+)^{''} e^{\tilde{d}(a, \cdot)/h} + a_1^- e^{-\tilde{d}(a, \cdot)/h} \equiv -h^3 f. \quad (18.6.20)$$

L'application du lemme donne donc

$$\begin{aligned} \|h(e^{\tilde{d}(a, \cdot)/h} u)'\|_{L^2}^2 &= -h^3 \operatorname{Re} \int_a^b e^{\tilde{d}(a, \cdot)/h} f \cdot e^{\tilde{d}(a, \cdot)/h} \bar{u} dx \\ &\leq h^3 \|e^{\tilde{d}(a, \cdot)/h} f\|_{L^2} \cdot \|e^{\tilde{d}(a, \cdot)/h} u\|_{L^2} \\ &\leq \frac{h^3}{2} (\|e^{\tilde{d}(a, \cdot)/h} f\|_{L^2}^2 + \|e^{\tilde{d}(a, \cdot)/h} u\|_{L^2}^2). \end{aligned} \quad (18.6.21)$$

Par ailleurs, la même inégalité d'énergie donne avec cette fois $\varphi \equiv 0$, en prenant la partie imaginaire :

$$hk|u(a)|^2 + h\sqrt{k^2 + B}|u(b)|^2 = -\operatorname{Im} \int_a^b \bar{u}(\tilde{P}(h) - k^2)u dx. \quad (18.6.22)$$

Comme $\tilde{\psi}_-^h(k, \cdot)h$ est uniformément borné sur I par rapport à h, k d'après la proposition 14.5 p.163, et qu'il en est de même pour f , on déduit en particulier que

$$h|u(a)|^2 = \mathcal{O}(h^3). \quad (18.6.23)$$

En écrivant toute fonction H^1 comme intégrale de sa dérivée, on a facilement des inégalités type Sobolev : pour des constantes $c, C > 0$ indépendantes de h

$$\|e^{\frac{\tilde{d}(a, \cdot)}{h}} u\|_{L^2} \leq ch^{-1} \|(he^{\frac{\tilde{d}(a, \cdot)}{h}} u)'\|_{L^2} + C|u(a)|$$

et donc

$$\|e^{\frac{\tilde{d}(a,\cdot)}{h}}u\|_{L^2}^2 \leq 2c^2h^{-2}\|(he^{\frac{\tilde{d}(a,\cdot)}{h}}u)'\|_{L^2}^2 + 2C|u(a)|^2.$$

Par suite, pour $h > 0$ assez petit, en mettant bout à bout l'inégalité qui précède avec (18.6.21), on obtient, utilisant (18.6.24)

$$\begin{aligned} \|h(e^{\tilde{d}(a,\cdot)/h}u)'\|_{L^2}^2 &\leq \frac{h^3}{2}\|e^{\tilde{d}(a,\cdot)/h}f\|_{L^2}^2 + c^2h\|h(e^{\tilde{d}(a,\cdot)/h}u)'\|_{L^2}^2 \\ &+ C^2h^3|u(a)|^2. \end{aligned} \quad (18.6.24)$$

Par suite, le second terme du membre de droite de (18.6.24) se faisant absorber par le membre de gauche pour $h > 0$ assez petit, on obtient finalement

$$\|h(e^{\tilde{d}(a,\cdot)/h}u)'\|_{L^2}^2 = \mathcal{O}\left(h^3\|e^{\tilde{d}(a,\cdot)/h}f\|_{L^2}^2\right) + \mathcal{O}(h^6). \quad (18.6.25)$$

Revenant à la définition de f on voit que

$$\|(e^{\frac{\tilde{d}(a,\cdot)}{h}}f)\|_{L^2} = \|e^{2\tilde{d}(a,\cdot)/h}a_1^{+''} + a_1^{-''}\|_{L^2}. \quad (18.6.26)$$

D'après l'expression (18.6.9) de a_1^\pm et les estimations (18.6.16)-(18.6.18), on voit, puisque $2(\tilde{d}(a, x) - \tilde{d}(a, b)) = -2\tilde{d}(b, x)$, que le membre de droite de (18.6.26) est $\mathcal{O}(h^3)$. Ainsi

$$\|h\tilde{u}'\|_{L^2} = \mathcal{O}(h^{3/2}), \quad \text{avec} \quad \tilde{u} := e^{\frac{\tilde{d}(a,\cdot)}{h}}u. \quad (18.6.27)$$

On revient enfin à des estimations ponctuelles en écrivant encore \tilde{u} comme intégrale de sa dérivée

$$\forall x \in I, \quad |\tilde{u}(x)| \leq |\tilde{u}(a)| + (b-a)h^{-1}\|h\tilde{u}'\|_{L^2},$$

et en utilisant (18.6.22). ■

18.41. Remarque.

1. On aurait pu calculer un développement WKB à l'ordre 0 de $\tilde{\psi}_-(k, \cdot)$. Dans ce cas, le membre de droite (18.6.26) est seulement $\mathcal{O}(h^{1/2})$, ce qui est insuffisant pour le but visé.
2. Noter que la fonction $a_0^+ e^{\tilde{d}(a,\cdot)/h}$ est, d'après (18.6.18), une fonction ponctuellement $\mathcal{O}(e^{-2(\tilde{d}(a,b)+\tilde{d}(a,x))/h})$. L'argument de l'exponentielle s'interprète comme la distance de x à b en passant par a . C'est aussi ce qui a été mis en évidence dans le cas du potentiel constant (prop. 6.10 p.65) : dans ce cas particulier en effet, la méthode WKB est exacte.

18.6.2 Preuve de la proposition 18.24

■ **Énoncé.** On se place sous l'hypothèse 18.16. Supposons en outre que le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h$ est de classe C^2 sur I , et est uniformément borné par rapport à h dans $C^2(I)$. Fixons $j \in \{1 \dots N\}$, et soit λ un réel dans \mathcal{L}_j^h . Alors, pour $j = 1 \dots N$, il existe une constante $\alpha_j^\bullet(h)$ de limite non nulle telle que

$$|\Phi_j^\bullet(\lambda)| \underset{h \rightarrow 0}{\sim} \alpha_j^\bullet(h) h^{1/2} e^{-\tilde{d}_j(\bullet, c_j)/h}, \quad (18.6.28)$$

où $\bullet = a, b$ et \tilde{d}_j est la distance d'Agmon pour le potentiel $\tilde{\mathcal{V}}^h$ à l'énergie E_j^h .

Preuve. Faisons les calculs pour $\bullet = a$. Par définition, on a

$$\Phi_j^a(\lambda) = \langle W^h \tilde{\psi}_-^h(\sqrt{\lambda}, \cdot), \psi_j^h \rangle_{L^2}, \quad (18.6.29)$$

qui se récrit d'après la proposition 18.39,

$$|\Phi_j^a(\lambda)| = |C_a(\sqrt{\lambda})| \left| \left\langle \frac{e^{-\tilde{d}(a, \cdot)/h}}{\partial_x \tilde{d}(a, \cdot)^{1/2}}, W^h \tilde{\psi}_-^h \right\rangle_{L^2} \right| (1 + o(1)), \quad h \rightarrow 0, \quad (18.6.30)$$

\tilde{d} désignant la distance d'Agmon à l'énergie λ . Avec l'expression de C_a , on voit que pour $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$, on a

$$\forall \lambda \in \mathcal{L}_j^h, \quad |C_a(\sqrt{\lambda})| = |C_a(\sqrt{E_j^h})| (1 + o(1)), \quad h \rightarrow 0,$$

et ceci uniformément par rapport à λ .

Noter ensuite que pour h assez petit, la fonction ψ_j^h est nulle sur le support de c_i ($i \neq j$) puisque les ouverts de Dirichlet correspondants sont disjoints par construction. Par suite l'expression ci-dessus est inchangée si l'on remplace W^h par w_j^h .

Par changement de variables, on est ramené à étudier

$$\mathcal{I}(h) := \int_{-1}^1 \frac{e^{-\tilde{d}(a, c_j + hy)/h}}{\partial_x \tilde{d}(a, c_j + hy)^{1/2}} w_j^h(y) \psi_j^h(c_j + hy) dy. \quad (18.6.31)$$

Le vecteur propre ψ_j^h est associé à la plus petite valeur propre de $H_D^{\Omega_j}(h)$, (hypothèse 18.16), le membre de droite de (18.6.31) est donc pour $h > 0$ fixé, non nul (théorème de Perron-Frobenius). Montrons ensuite le

■ **18.42. Lemme.** *Il existe une constante c non nulle telle que*

$$I(h) := \int_{c_j-h}^{c_j+h} \frac{w_i^h(x) \psi_j^h(x)}{(\partial_x \tilde{d}(a, x))^{1/2}} dx \underset{h \rightarrow 0}{\sim} ch^{1/2},$$

uniformément par rapport à $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$.

Preuve. Par changement de variables, on est ramené à étudier

$$I(h) = \int_{-1}^1 \frac{w_i(y) \psi_j^h(c_j + hy)}{(\partial_x \tilde{d}(a, c_j + hy))^{1/2}} dy.$$

Pour cela, on compare ψ_j^h à la fonction propre normalisée $\hat{\psi}^h$ correspondant à la plus petite valeur propre $\hat{\mu}^h$ du hamiltonien approché $\hat{H}(h)$ défini par (12.3.5) p.129 (rappelons que son potentiel est constant égal à $\tilde{\mathcal{V}}^h(c_j)$ modulo w_j). Ainsi on a

$$\hat{\psi}^h(x) = h^{-1/2} \hat{\psi}_* \left(\frac{x - c_j}{h} \right), \quad (18.6.32)$$

pour une fonction signée $\hat{\psi}_*$ ne dépendant pas de h . En outre, par définition des énergies asymptotiquement résonantes, $\hat{\mu}_j^h = \lambda_* + (\mathcal{V}^h(c_j) - \mathcal{V}^h(c_0))$. On considère ensuite une fonction de troncature χ_j valant 1 sur l'ouvert Ω_j privé d'un η -voisinage des points de bord, $\eta > 0$ arbitrairement petit. Soit enfin Π le projecteur orthogonal sur la droite engendrée par ψ_j^h . On montre que $\chi_j \hat{\psi}^h$ est une borne approximation uniforme de ψ_j^h autour de c_j . Pour cela on écrit que :

$$\psi_j^h - \chi_j \hat{\psi}^h = (\psi_j^h - \Pi \chi_j \hat{\psi}^h) + (\Pi \chi_j \hat{\psi}^h - \chi_j \hat{\psi}^h). \quad (18.6.33)$$

Si γ est le petit cercle dans le plan complexe centré en λ_* et de rayon δ (qui a été choisi pour ne contenir que l'énergie résonante λ_*) on a pour $h > 0$ assez petit les formules d'un type déjà rencontré (cf. p.ex. p.235 et p.155)

$$\psi_j^h - \Pi \chi_j \hat{\psi}^h = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma} (H_D^{\Omega_j} - z)^{-1} (\psi_j^h - \chi_j \hat{\psi}^h) dz. \quad (18.6.34)$$

et

$$(\Pi - Id) \chi_j \hat{\psi}^h = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma} (z - \hat{\mu}^h)^{-1} (H_D^{\Omega_j} - z)^{-1} ([P, \chi_j] \hat{\psi}^h + (\tilde{\mathcal{V}}^h(x) - \tilde{\mathcal{V}}^h(c_j)) \hat{\psi}^h) dz, \quad (18.6.35)$$

Avec le caractère uniformément lipschitzien des fonctions $\tilde{\mathcal{V}}^h$, la décroissance exponentielle de $\hat{\psi}^h$ et l'estimation du noyau de la résolvante du corollaire 12.15 p. 138, on obtient que le membre de droite de (18.6.33) est $\mathcal{O}(h^\alpha)$ pour $\alpha \in [0, 1[$ arbitraire (utiliser les arguments (12.3.13)-(12.3.17) p.131).

Il reste à étudier alors :

$$\hat{I}(h) := \int_{-1}^1 \frac{w_i(y) \chi_j(c_j + hy) \hat{\psi}^h(c_j + hy)}{(\partial_x \tilde{d}(a, c_j + hy))^{1/2}} dy,$$

puisque

$$I(h) = \hat{I}(h) + \mathcal{O}(h^\alpha), \quad \forall \alpha \in [0; 1[.$$

Mais revenant à la définition (18.6.32) de $\hat{\psi}^h$, on a

$$\begin{aligned} \hat{I}(h) &= h^{1/2} \int_{-1}^1 \frac{w_i(y) \chi_j(c_j + hy) \hat{\psi}_*(y)}{(\partial_x \tilde{d}(a, c_j + hy))^{1/2}} dy \\ &= h^{1/2} \int_{-1}^{-1} \frac{w_i(y) \hat{\psi}_*(y)}{(\partial_x \tilde{d}(a, c_j + hy))^{1/2}} dy, \end{aligned}$$

la fonction χ_j valant 1 autour du puits. On achève ainsi la preuve du lemme, puisque l'intégrale ci-dessus convergeant lorsque $h \rightarrow 0$ vers la même expression dans laquelle \tilde{d} est remplacée par d_* et ceci uniformément par rapport à $\lambda \in \mathcal{L}_j^h$, la fonction

$$(x, \lambda) \mapsto (\partial_x \tilde{d}(a, x))^{-1/2} = (\tilde{\mathcal{V}}^h(x) - \lambda)^{-1/4}$$

étant lipschitzienne en la seconde variable sur \mathcal{L}_j^h , et ce uniformément par rapport à $x \in I$. ■

Pour finir la preuve, on revient à (18.6.31) et on applique le théorème des accroissements finis au facteur exponentiel entre c_j et $c_j + hy$. Cela donne que

$$\mathcal{I}(h) = e^{-\tilde{d}(a, c_j)/h} I(h) + \mathcal{O}(e^{-\varepsilon/h}), \quad (18.6.36)$$

et puisque $\lambda = E_j^h + \mathcal{O}(\Gamma_j e^{\sigma/h})$, on peut remplacer sans douleur \tilde{d} par d_j , pourvu que $0 < \sigma < 2S_0$, cela induisant un facteur $e^{\mathcal{O}(\Gamma_j e^{\sigma/h})/h} = 1 + o(1)$, ce que l'on peut supposer. On conclut avec le fait que

$$|\Phi_j^a(\lambda)| = |C(\sqrt{E_j^h}) \mathcal{I}(h)| (1 + o(1)), \quad h \rightarrow 0.$$

■

Bibliographie

- [Ag1] Agmon, S., *Lectures on exponential decay of Solutions of Second-Order Elliptic Equations*, Princeton University Press, 1998.
- [Ag2] Agmon, S., *Spectral Properties of Schrödinger Operators and Scattering Theory*,
- [AgCo] Aguilar, J., Combes, J. M., *A class of analytic perturbations for one-body Schrödinger Hamiltonians*. *Comm. Math. Phys.* **22** (1971), 269-279.
- [Am-Se] Amar-Servat, E., *Solutions asymptotiques et résonances pour les opérateurs de Klein-Gordon et Schrödinger*, Thèse de doctorat, Université Paris-Nord, décembre 1992.
- [Ba] Basdevant, J.J., *Mécanique quantique*, tome **1** École Polytechnique, éd. 1985.
- [BaCo] Balslev, E., Combes, J. M., *Spectral properties of many-body Schrödinger operators with dilatation-analytic interactions*. *Comm. Math. Phys.* **22** (1971), 280-294.
- [Bo] Bonilla, L.L., *et al.*, *Self-oscillations of Domains in Doped GaAs-Al-As Superlattices*, *Phys. Rev. B* **52** :19, November 1995, 13761-13764.
- [BoMi] Bony, J.-F., Michel, L., *Microlocalization of resonant states and estimates of the residue of the scattering amplitude* , *Comm. Math. Phys.*, **246**, 375-402 (2004).
- [Bre] Brennan, K.F., *The Physics of Semiconductors with applications to optoelectronic devices*, Cambridge University Press, 1999.
- [Bré] Brézis, H., *Analyse fonctionnelle*, Masson, 1983.
- [BenDegMar] Ben Abdallah, N., Degond P., Markowich P.A., *On a one-dimensional Schrödinger-Poisson scattering model*, *Z. angew. Math. Phys.*, Birkhauser Verlag, vol. **48** 135-155, 1997.
- [Da] Davies E. B., *Spectral Theory and Differential Operators*, Cambridge University Press, 1995.
- [DeTr] Deift, P., Trubowitz, E., *Inverse Scattering on the Line*,. *Comm. on Pure and applied mathematics*, March 1979, vol. **XXXII**, n° 2, 121-251.
- [DiSj] Dimassi, M., Sjöstrand, J., *Spectral Asymptotics in the Semi-classical Limit*, Cambridge university Press, 1999.

- [GeMa] Gérard, C. & Martinez, A., *Semi-Classical Asymptotics for the Spectral Function of Long-Range Schrödinger Operators*, *Journal of Functional Analysis*, vol. **84**, No. 1, May 1989.
- [GrMaSa] Grecchi, V., Martinez, A., Sacchetti, A., *Destruction of the Beating Effect for a Non-linear Schrödinger Equation*, *Comm. Math. Phys.*, **227**, 191-209, 2002.
- [Ha] Harell, E., *Double Wells*, *Comm. Math. Physics* **75**, 239-261, 1980.
- [He] Helffer, B., *Semi-Classical Analysis for the Schrödinger Operator and Applications*, *Lecture Notes in Mathematics*, Springer-Verlag, vol. **1336**.
- [HeMa] Helffer, B., Martinez, A., *Comparaison entre les différentes notions de résonances*, *Helv. Phys. Acta* **60** n° 8, 992-1003, 1987.
- [HeSj1] Helffer, B. & Sjöstrand, J., *Résonances en limite semi-classique*, *Supplément au Bulletin de la société Mathématique de France*, 1986, Tome **114**/fascicule 3.
- [HeSj2] Helffer, B. & Sjöstrand, J., *Multiple wells in the semi-classical limit I*, *Comm. In PDE*, **9** (4), 337-3348, 1984.
- [HeSj3] Helffer, B. & Sjöstrand, J., *Puits Multiples en limite semi-classique II. Interaction moléculaire. Symétries. Perturbation.*, *Annales de l'IHP, Physique Théorique*, Vol. **42**/ 2, 1985.
- [HiSi] Hislop, P.D., Sigal, I.M., *Intoduction to Spectral Theory with applications to Schrödinger operators*, Springer, 1996.
- [JLPS] Jona-Lasinio, G., Presilla, C., Sjöstrand J., *On Schrödinger Equations with Concentrated Nonlinearities*, *Ann. Phys.*, **240** (1), 1995.
- [Ka] Kapon, E., *Semiconductor Lasers I, fundamentals*, Academic Press, 199.
- [KiSi] Kirsch, W. & Simon, B., *Universal Lower Bounds on Eigenvalues Splitting for One Dimensional Schrödinger Operators*, Springer, *Comm. in Math. Phys.*, Springer Verlag 1985.
- [Kit] Kittel, C., *Elementary Solid Physics : a short course*, John Winley&Sons, Inc., New York, 1962.
- [LaMa] Lahmar-Benbernou, A., Martinez, A., *On Helffer-Sjöstrand's Theory of Resonances*, *International Math. Research Notices*, 697-717, 2002.
- [Me1] Messiah, A., *Mécanique quantique*, Tome 1, Dunod, Paris, 1965.
- [Me2] Messiah, A., *Mécanique quantique*, Tome 2, Dunod, Paris, 1965.
- [Ni1] Nier, F., *The dynamics of some open systems with short-range nonlinearities*, *Nonlinearity* **11**, 1998.
- [Ni2] Nier, F., *Schrödinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$: The whole-space case*, *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, **123A**, 1993.

-
- [NiPa] Nier, F., Patel, M., *Non-linear Asymptotics for Quantum Out-of-Equilibrium 1D Systems : Reduced Models and Algorithms*, in *Multiscale Methods in Quantum Mechanics, Theory and Experiment*, Blanchars & Dell'Antonio Editors, Birkhäuser, 2003.
 - [Pe] Perelman, G., *Exposé au séminaire X-EDP, d'après notes manuscrites de F. Nier*.
 - [Pi] Pinault, O., *Analyse mathématique et numérique de quelques problèmes de transport dans les nanostructures*, Thèse de doctorat, Université P. Sabatier, Toulouse, octobre 2003.
 - [PrSj] Presilla, C. & Sjöstrand, J., *Transport properties in resonant tunnelling heterostructures*, *J. math. Phys.* **37**, October 1996.
 - [ReSi1] Reed, M. & Simon, B., *Methods of Modern Mathematical Physics, Tome 1, Functional Analysis*, Academic Press, 1978.
 - [ReSi2] Reed, M. & Simon, B., *Methods of Modern Mathematical Physics, Tome 2, Fourier Analysis, SelfAdjointness*, Academic Press, 1978.
 - [ReSi3] Reed, M. & Simon, B., *Methods of Modern Mathematical Physics, Tome 3, Scattering Theory*, Academic Press, 1978.
 - [ReSi4] Reed, M. & Simon, B., *Methods of Modern Mathematical Physics, Tome 4, Analysis of Operators*, Academic Press, 1978.
 - [Shu] Shubin, M.A., *Pseudodifferential Operators and Spectral Theory*, Springer-Verlag, 1987.
 - [SjZw] Sjöstrand, J., Zworski, M., *Elementary Linear Algebra for Advanced Spectral Problems*, [http : //math.berkeley.edu/~zworsky/](http://math.berkeley.edu/~zworsky/), December 2003.
 - [Ya1] Yafaev, D. R., *Scattering Theory :Some Old and New Problems*, *Lecture Notes in Mathematics*, Springer-Verlag, vol.**1735**.
 - [Ya2] Yafaev, D. R., *Mathematical Scattering Theory, General Theory*, American Math. Soc., vol **105**, 1992.

Symboles

$\ \cdot\ _{j,h}, \quad j \in \mathbb{N}^*, \quad 89$	$E(\zeta, z; h), E(z), \quad 186$
$\lesssim_\eta, \quad 123$	$E^+(\zeta, z; h), E^+(z; h), \quad 186$
$\sqrt{\cdot}^+, \quad 35$	$E^-(\zeta, z; h), E^-(z; h), \quad 186$
$[u_+, u_-], \quad 36$	$E^{-+}(\zeta, z; h), E^{-+}(z; h), \quad 186$
$[\Psi_+, \Psi_-], \quad 47$	$e_k, e_k^0, \quad 127$
$\partial E / \partial \lambda(\lambda; h), (E(\lambda; h))_\lambda, \quad 23$	$e_k^i, \quad 140$
	$\mathcal{F}(\zeta, z; h), \quad 178$
$a_l(h), \quad 175$	$\mathcal{G}(\zeta, z; h), \quad 183$
$B, \quad 19$	$\mathcal{H}, \quad 22$
$\mathcal{B}, \mathcal{B}_0, \mathcal{B}_\infty \quad 19$	$\mathcal{H}_D(z), \quad 177$
$BV_0^2(I), \quad 28$	$\mathcal{H}(\zeta, z; h), \quad 178$
$C^{0,\alpha}(I), \quad 28$	$\mathcal{H}(z; h), \quad 186$
$C_c(I), \quad 19$	$\hat{H}_0, \quad 127$
$c_1 \dots c_N, \quad 22$	$H(h), \quad 22$
$\vec{d}, \quad 97$	$\tilde{H}(h), \quad 22$
$d(x, y; V'\lambda), \quad 89$	$H(z; h), \quad 73$
$dn_\theta[A_\nu], dn_\theta[H] \quad 105$	$H'(z; h), \quad 76$
$dn[\rho^h], \quad 27$	$H_\infty(h), \quad 22$
$dn_g[K_-^h], \quad 216$	$H_{ref}(h), \quad 22$
$dn_g[K_-^{NRh}], \quad 219$	$H_B, \quad 33$
$\mathcal{E}(H(h)) \quad 127, 140$	$H_D^{NR}(h) \quad 167$
$\mathcal{E}_D(z), \quad 177$	$H_D^\Omega(h) \quad 174$
$\mathcal{E}_i \quad 140$	$H_D^{\Omega i}(h) \quad 145$
$\mathcal{E}_j^h \quad 244$	$H_{NR}(\zeta; h) \quad 167$
$\mathcal{E}_{rés}, \quad 143$	$\mathcal{I}(\varepsilon_0), \quad 160$
$(E(\lambda; h))_\lambda, \partial E / \partial \lambda(\lambda; h), \quad 23$	$\mathcal{I}(\varepsilon_*), \quad 174$
$E_0(z), E_0, \quad 177$	$\mathcal{I}_l, \quad 204$
$E_0^+, \quad 177$	$I = [a; b], \quad 19$
$E_0^-, \quad 177$	$J(\lambda), \quad 141$
$E_0^{-+}(z), E_0^{-+}, \quad 177$	$\mathcal{K}(\zeta, z; h), \quad 180$

-
- $\mathcal{K}'(\zeta, z; h)$, 184
 K_-^h , 215
 \mathbb{K} , 127
 \mathcal{L}_j^h , 244
 $(\mathcal{M}_b(I), \|\cdot\|_m)$, 28
 $m(\lambda)$, 141
 N , 21
 \tilde{O} , 123
 $\tilde{P}(h)$, 20
 $P_\infty(h)$, 19
 $P_{ref}(h)$, 19
 $P(h)$, 22, 139, 174
 $R(z; h)$, 23
 $\mathcal{R}(z), \mathcal{R}_B^b(z)$, 40
 $R_B(z)$, 33
 $r_\pm(z), t_\pm(z)$, 36
 $\mathcal{S}(z)$, 63
 S_0 , 178
 S_0^λ , 219
 S_1 , 145
 S_{NR} , 168
 S_I , 193
 S_U , 193
 $\mathbb{T}(z)$, 63
 $\mathcal{T}(z), \mathcal{T}(\lambda(k))$, 64
 U^h , 21
 U_R^h, U_{NR}^h , 167
 u_+, u_- , 35
 v_+, v_- , 46
 V_1 , 105
 \tilde{V}^0 , 126, 140
 \tilde{V}_0 , 21
 V_{int} , 25
 $V[\rho^h]$, 25
 V_{NL}^h , 21
 w_i, W^h , 21
 w_∞ , 21
 W_R^h, W_{NR}^h , 167
 $z^{1/2}$, 62
 $\alpha(h)$, 167
 Γ_j^h , 244
 $\varepsilon_+, \varepsilon_-$, 128
 $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_l, \dots, \varepsilon_r$, 143
 ε_* , 175
 θ_i , 146
 $\kappa_l(h)$, 175
 $\lambda_1, \lambda_l, \lambda_r$, 143
 Λ_0 , 20
 $\lambda(k), k \mapsto \lambda(k)$, 58
 $\Lambda_l(h)$, 167
 Λ_* , 242
 Λ_*, Λ^* , 20
 $\mu_k^i(0)$, 140
 ρ^h , 25
 $\rho_\pm(z), \tau_\pm(z)$, 46
 $X\Psi$, 146
 Φ , 146
 $\tilde{\chi}_i$, 151
 χ_i , 146
 χ_p^η , 135
 Ψ , 146
 $\Psi^h(\zeta)$, 234
 $\Psi_\pm(z, \cdot)$, 47
 $\{\psi_-^h(k, \cdot)\}_k$, 26
 $\psi_j(h)$, 146
 $\omega_l(h)$, 175
 $\Omega(\varepsilon_0; h)$, 160
 $\Omega(\varepsilon_*; h)$, 174
 Ω_i , 145

Index

- Agmon
 - distance, 89, 90, 178
 - monotonie, 92
 - distance du puits à la mer , 178
 - méthode, 87
 - métrique , 89
- Analyse semi-classique, 9, 70, 126
- Boite noire, 69
- Calcul fonctionnel, 23, 95
- Coefficient
 - de réflexion, 58
 - de transmission, 58
- Conditions
 - anti-résonantes, 75, 76
 - aux limites, 24, 62, 70, 173
 - transparentes, 75
 - de Bohr-Sommerfeld, 62
 - de Dirichlet, 173
 - de radiation, 62
 - résonantes, 73, 75, 173
- Densité
 - de charges, 10
 - de particules, 105
 - spectrale, 23
- Dilatations analytiques, 69
- Diode à effet tunnel, 8
- Distance
 - d'Agmon, 89, 90
 - monotonie, 92
 - entre sous-espaces, 96
- Domaine d'énergie, 20
- Effet
 - de peau, 67
 - tunnel, 87, 222
- Énergie
 - asymptotiquement résonante, 127, 141
 - multiplicité asymptotique, 141
- Équation
 - de Liouville, 25
 - de dispersion, 58
 - de Liouville, 10, 11
 - stationnaire, 10
 - de Lippmann-Schwinger , 46
 - de Poisson, 10, 28, 218
 - de transport, 258
 - eiconale, 89
- Espace des phases, 10, 58
- États
 - bornés, 10, 33
- États de diffusion, 33
 - voir fonctions propres généralisées*, 26
 - résonants, 73
- Extension presque analytique, 96
- Fermi-Dirac, statistique de , 26
- Flux partiels, 243
 - locaux, 244
- Fonction de biais, 9
- Fonctions
 - de l'énergie, 54
 - de Green, 34
 - de l'énergie, 23, 59
 - du moment, 60
- Fonctions propres
 - décroissance, 120, 129
 - de Dirichlet, 82, 119
 - généralisées, 26, 33, 57

- développement en , 40
- entrantes, 59
- sortantes, 59
- Formule
 - de Breit-Wigner, 231
 - de Helffer-Sjöstrand, 95
 - de Stone, 23, 39, 43, 49, 202
- Hamiltonien, 9, 22
- Île, 8
- Méthode WKB, 257
- Marche de potentiel, 20, 33
- Matrice de Gram, 98
- Matrice densité, 10, 25
- Mesure
 - de Dirac, 77
 - spectrale, 54
- Modèle d'Hartree, 10
- Moment, 57
- Onde
 - plane, 26, 57
 - entrante, 57
 - vecteur d', 57
- Opérateur
 - à trace, 98, 206, 208
 - au sens des formes, 77
 - avec conditions transparentes, 75
 - de Hilbert-Schmidt, 38
 - intégral, 34
- Potentiel
 - auto-consistant, 28
 - marche de, 20, 33
 - saut de, 20, 33, 37
- Principe
 - d'absorption limite, 23, 33, 34, 37–40, 42, 46
 - de monotonie, 109
- Problème
 - à l'équilibre, 10
 - aux limites, 42, 61
 - avec puits bouché, 20
 - de Dirichlet, 98, 119, 126, 173
 - de Grushin, 159, 173, 175, 178
 - de référence, 19
 - du puits dans l'île, 21
 - elliptique, 173
 - hors-équilibre, 10, 60
 - résonant, 64
 - semi-linéaire, 25, 29
- Puits
 - alimenté, 220
 - asymptotiquement résonant, 141
 - bien groupés, 221
 - de potentiel, 21
 - isolés, 225
 - non-alimenté, 220
 - quantique, 8, 9, 21
 - strictement isolés, 225
- Règle d'or de Fermi, 231, 239
- Région
 - classiquement interdite, 87
 - entrante, 58
- Relation de dispersion, 58, 62
- Résolution spectrale, 23, 39, 45
- Résolvante, 23, 24, 33, 173
 - valeurs au bord, 33, 59
- Résonances, 11, 24, 69–71, 82, 83, 178, 189, 191
 - multiplicité algébrique, 73, 191
 - multiplicité géométrique, 73
 - partie imaginaire des, 82, 186, 191
- Revêtement à deux feuillettes, 24
- Saut de potentiel, 20, 33, 37
- Scattering, 33
 - time-dependent, 33
- Seuils, 59
- Solution
 - classique, 217
 - quantique, 217
- Spectre, 96, 126
 - absolument continu, 39, 54
 - continu, 23, 54, 55
 - discret, 98

- essentiel, 23, 39, 127
- multiplicité du, 59
- purement ponctuel, 39, 48, 55
- singulier, 38
- singulier continu, 39
- Statistique de Fermi-Dirac , 26
- Système
 - conservatif, 87
 - ouvert, 27
 - Schrödinger-Poisson, 7, 25
- Théorème
 - de comparaison, 98
 - de Kato, 23, 55
 - de Mercer, 99, 107
 - de Rouché, 190
- Trace
 - cyclicité, 98
 - locale, 101
 - opérateur à, 98
- Transformation de Fourier généralisée, 60
- Valeurs propres, 70, 77, 126
 - plongées, 48, 69, 78
 - splitting, 226
- Variables
 - de Prüfer, 229
- Wronskien, 37, 47

Développement de modèles macroscopiques pour des systèmes quantiques non-linéaires hors-équilibre

Résumé. Cette thèse a pour objectif de proposer un modèle mathématique pour le transport électronique hors-équilibre dans des systèmes mésoscopiques tels que les hétérostructures ou les super-réseaux. On est amené à faire une étude asymptotique de systèmes non-linéaires stationnaires 1D du type Schrödinger-Poisson hors-équilibre. Le potentiel présente des sauts ainsi que des puits quantiques ponctuels à la limite.

Pour l'étude non-linéaire à proprement parler, on établit l'existence de solutions asymptotiques, et que celles-ci sont déterminées par un nombre fini de paramètres. Néanmoins, le gros de l'étude consiste en une compréhension des propriétés spectrales de l'équation de Schrödinger linéaire associée, le système non-linéaire étudié étant semi-linéaire. La nature du problème nécessite une analyse sur le spectre continu, qui plus est la présence des puits engendre des résonances quantiques.

Après avoir établi l'asymptotique des fonctions du Hamiltonien, on s'attarde sur les fonctions du moment. Leur analyse, plus complexe, est étroitement liée aux résonances de l'opérateur. On fournit une réponse complète dans les cas où la répartition des puits permet un traitement de ces résonances, notamment lorsque les puits sont bien groupés ou confinés à l'intérieur de l'île et suivant qu'ils sont alimentés ou non. Cette discussion met en évidence l'existence de solutions stationnaires dites classiques, par opposition aux solutions de nature quantique. On termine l'étude en mettant en évidence l'existence de solutions quantiques dans des cas particuliers.

Mots-clés. Système Schrödinger-Poisson, problèmes hors-équilibre, puits quantiques, résonances quantiques, moment asymptotique.

Macroscopic models for nonlinear out-of-equilibrium quantum systems

Abstract. This document proposes a mathematical framework to analyze far-from-equilibrium electronic transport in mesoscopic devices, like heterostructures or superlattices. This leads to study the asymptotics of nonlinear-1D-Schrödinger-Poisson systems. The potential is made with quantum wells in a semiclassical island with cliffs.

The main result for the nonlinear theory is the existence of asymptotical steady states. Moreover we show that they lie in a finite-dimensional subspace of continuous functions.

Besides, one focuses on the understanding of spectral properties of the linear Schrödinger Operator for this semilinear problem. In this framework we lead the analysis over the continuous spectrum. The quantum wells generate quantum resonances. First we give results about functions of the Hamiltonian.

Next, we focus on the more delicate case of functions of the asymptotical momentum. Results are given when the distribution of the wells over the island ensures good treatment of the resonances : for instance, whenever the wells are gathered or confined far from the boundary of the island. This establishes classical-like solutions, and we finish our analysis by showing the possible existence of quantum-like solutions.

Keywords. Schrödinger-Poisson-systems, out-of-equilibrium problems, quantum wells, quantum resonances, asymptotical momentum.